

# Optimierung von Röntgenoptiken für die Hochenergie-Elektronen- Spektromikroskopie

## Diplomarbeit

Friedrich-Schiller-Universität Jena  
Physikalisch-Astronomische Fakultät



eingereicht von Hilmar Straube  
geboren am 30. Juni 1982 in Halle/Saale

Erstgutachter: Prof. Dr. rer. nat. habil. E. Förster  
*Institut für Optik und Quantenelektronik*

Zweitgutachter: Prof. Dr. rer. nat. habil. A. Tünnermann  
*Institut für angewandte Physik*

Tag der Verleihung des Diploms: .....

# Einleitung

Der Fortschritt der Lasertechnik in den letzten Jahren hat das schnell wachsende Feld der Interaktion von Materie mit kurzen Laserpulsen eröffnet. Eine der wichtigsten Anwendungen ist die Erzeugung von harter Röntgenstrahlung [Gib05]. Dabei werden Elektronen im von der steigenden Flanke des Laserpulses selbst erzeugten Plasma an einer Materialoberfläche durch außerordentlich hohe elektrische Feldstärken des hochintensiven Pulses (etwa  $3 \cdot 10^{17} \text{ W cm}^{-2}$  am Jenaer 1 kHz-Ti:Sa-Laser [Käm04]) auf kleinem Raum so stark in das vom Laserpuls noch unbeeinflusste Material beschleunigt, dass sie dort Bremsstrahlung und charakteristische Röntgenstrahlung mit hoher Brillanz ( $10^{23} \text{ ph}/(\text{s cm}^2 \text{ mrad}^2)$  an der Titan  $K_\alpha$ -Linie) erzeugen. Die Emissionszeiten liegen dabei im Bereich einiger hundert Femtosekunden, sodass über Anrege-Abfrage-Experimente [RRG01] die zeitliche Entwicklung von Phänomenen wie akustische Phononen, chemische Reaktionen und Phasenübergänge untersucht werden kann.

Das Institut für Optik und Quantenelektronik ist im Projekt CORA (**Kompakte Röntgenanalytik**) unter Leitung der Gruppe von Professor Zacharias der Universität Münster eingebunden [COR05]. Das Verbundprojekt hat sich zum Ziel gesetzt, die Industrietauglichkeit verschiedener Komponenten eines auf einem Femtosekundenlaser basierten Systems zur Photoelektronen-Spektro-Mikroskopie zu verbessern. Bei dieser Analytik sollen die durch die Laser-Plasma-Interaktion erzeugten harten Röntgenphotonen monochromatisiert und auf die Probe fokussiert werden. Die Energie der erzeugten Photoelektronen wird in einem Flugzeitspektrometer ausgewertet [Cha92].

Der Jenaer Anteil an diesem Projekt ist die Herstellung einer Röntgenoptik, die die Quelle monochromatisiert und auf die Probe fokussiert. Zielsetzung dieser Diplomarbeit ist es, photoneneffiziente Braggreflexionen als Röntgenoptik vorzuschlagen und zu testen. Es sollen auch koplanar asymmetrische Reflexe<sup>1</sup> einbezogen werden, deren theoretische Behandlung als fokussierende Elemente bisher unvollständig ist.

Um korrekte Vorhersagen über das Reflexionsvermögen der in Frage kommenden gebogenen Kristalle machen zu können, müssen auch elastizitätstheoretische Überlegungen angestellt werden [UFGH93, CHWF96]. Diese Behandlungen gehen davon aus, dass die Kristalldurchbiegung kleiner als die Kristalldicke ist. In den letzten Jahren ist es vermehrt gelungen, auch deutlich größere gebogene Kristalle herzustellen. Es soll theoretisch und experimentell untersucht werden, welche Auswirkungen die hohen Durchbiegungen dieser Kristalle auf ihren elastischen Zustand und damit auf ihre Reflexionseigenschaften haben.

---

<sup>1</sup>Koplanar asymmetrisch (im Text oft kurz nur asymmetrisch genannt) bedeutet dabei, dass die Oberflächennormale einen Winkel mit der Normale der reflektierenden Netzebenen einschließt (asymmetrisch), dieser Winkel aber in der Ebene von Quelle und Fokus liegt (koplanar).

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Zur Theorie der koplanar asymmetrischen Reflexe</b>	<b>3</b>
1.1	Erweiterung der Formeln zur Braggwinkelabweichung . . . . .	3
1.2	Verallgemeinerte Effizienzformel . . . . .	9
1.3	Formen des effektiven Raumwinkels . . . . .	11
1.4	Fokussierung . . . . .	16
<b>2</b>	<b>Auswahl gebogener Kristalle für das Projekt CORA</b>	<b>23</b>
2.1	Wichtige Eigenschaften . . . . .	23
2.2	Reflexauswahl . . . . .	25
<b>3</b>	<b>Test gebogener Kristalle</b>	<b>30</b>
3.1	Versuche für Fokussierungen außerhalb des Rowlandkreises . . . . .	30
3.2	Test des Kristalls für Fe $K_{\alpha 1}$ für das CORA-System . . . . .	34
<b>4</b>	<b>Elastischer Zustand gebogener Kristalle</b>	<b>37</b>
4.1	Bekannte Eigenschaften . . . . .	37
4.2	Allgemeiner Fall voll anisotroper Kristalle . . . . .	38
4.3	Elastizitätstheorie ohne geometrische Näherung . . . . .	43
4.4	Reflexionskurvenmessung an einem zylindrisch gebogenen Kristall . . . . .	46
4.5	Ortsabhängige Messung des zentralen Braggwinkels . . . . .	50

# 1 Zur Theorie der koplanar asymmetrischen Reflexe

Die entscheidende Frage bei der Präparation gebogener Kristalle mit hoher Reflektionseffektivität ist, an welcher Stelle die Braggbedingung wie gut erfüllt ist. Betrachtet man eine Punktquelle, lässt sich das mit Hilfe der Braggwinkelabweichung  $\sigma$  beschreiben, die in jedem Punkt des gebogenen Kristalls die Abweichung des Einfallswinkels an dieser Stelle vom Einfallswinkel des Zentralstrahls auf den Kristall angibt. Sie wurde in [För85] eingeführt und in quadratischer Näherung für symmetrische Reflexionen angegeben. Eine weitere, vielbeachtete Arbeit, die auch für andere Geometrien, aber ebenfalls nur für symmetrische Reflexionen Braggwinkelabweichungen und ausgeleuchtete, effektive Flächen bestimmt, ist [WS90]. Die Gültigkeit dieser Formeln wurde mit numerischen Rechnungen für typische Geometrien in [MUF99] bestätigt. Dort werden zudem Ausdrücke für die Photonen-effizienz  $N_{\text{refl}}/N_0$  entwickelt, wobei die Autoren sich sehr früh in ihrer Ableitung auf die spezielle Form der Ausdrücke aus [För85] beziehen. Fallen nun Einfalls- und Braggwinkel wie bei asymmetrischen Reflexionen nicht mehr zusammen, sind die Formeln für die Braggwinkelabweichung und damit auch die Effizienzformeln nicht mehr anwendbar. Nach dem Muster von [För85, MUF99] sollen hier die entsprechenden Ausdrücke für den asymmetrischen Fall entwickelt werden.

Bei der asymmetrischen Fokussierung treten zu den geometrischen Abbildungsfehlern chromatische Abbildungsfehler hinzu. Man beschreibt sie durch die Überlagerung vom *monochromatischen* und *polychromatischen* Fokus [CK92]. Die polychromatischen Fokusbedingungen werden häufig angegeben (z. B. [CCF94, PWF01]). Die vertikale monochromatische Fokusbedingung soll hier entsprechend der Herleitung des horizontalen monochromatischen Fokus aus [CCF94] entwickelt.

Es sei noch auf eine Bezeichnungskonvention hingewiesen. Die Ebene, in der Zentralstrahl, Quelle und Fokus liegen, heißt in verschiedenen Quellen „horizontale Ebene“, „meridionale Ebene“ oder „Diffraktionsebene“, für alle drei Begriffe lassen sich gute Gründe anführen. In dieser Arbeit wird durchgängig von der „horizontalen Ebene“ die Rede sein.

## 1.1 Erweiterung der Formeln zur Braggwinkelabweichung

Vom Einfallswinkel  $\theta_0$  in Abhängigkeit der Divergenzwinkel  $\alpha$  und  $\Phi$  wird die geometrische Braggwinkelabweichung  $\sigma$  abgespalten

$$\theta_0(\alpha, \Phi) = \theta_0(0, 0) + \sigma(\alpha, \Phi).$$

Es wird eine Punktquelle in der Entfernung  $l_a$  angenommen. Die Horizontal- und Vertikaldi-  
vergenzen  $\alpha$  und  $\Phi$  sind jeweils vom Zentralstrahl (siehe Abbildung 1.1) aus definiert,  $\alpha = \Phi = 0$   
ist der Zentralstrahl.

### 1.1.1 Frühere Ergebnisse

In [För85] (angegeben auch in [MUF99]) wurde  $\sigma$  in quadratischer Näherung für ebene und  
sphärisch und torisch gebogene Kristalle bestimmt, letztere ausschließlich für das Radienver-  
hältnis  $R_v/R_h = \sin^2 \theta_B$ . In diesem Fall gilt:

$$\sigma_T \approx \frac{k-1}{2k} \alpha + \frac{1}{2 \tan \theta_B} \alpha^2 - \frac{k-1}{4k} \tan \theta_B \cdot \left(1 - \frac{k+1}{2k \sin^2 \theta_B}\right) \Phi^2,$$

und im sphärischen Fall

$$\sigma_S \approx \frac{k-1}{2k} \alpha + \frac{1}{2 \tan \theta_B} \alpha^2 - \frac{k-1}{4k} \tan \theta_B \cdot \left(1 - \frac{k+1}{2k} \sin^2 \theta_B\right) \Phi^2.$$

Der Parameter  $k$  ist der Abbildungsmaßstab

$$k = \frac{l_b}{l_a} = \frac{R_h \sin \theta_B}{2l_a - R_h \sin \theta_B}.$$

Für den ebenen Kristall schließlich

$$\sigma_E = \alpha - \frac{\Phi^2}{2} \tan \theta_B.$$

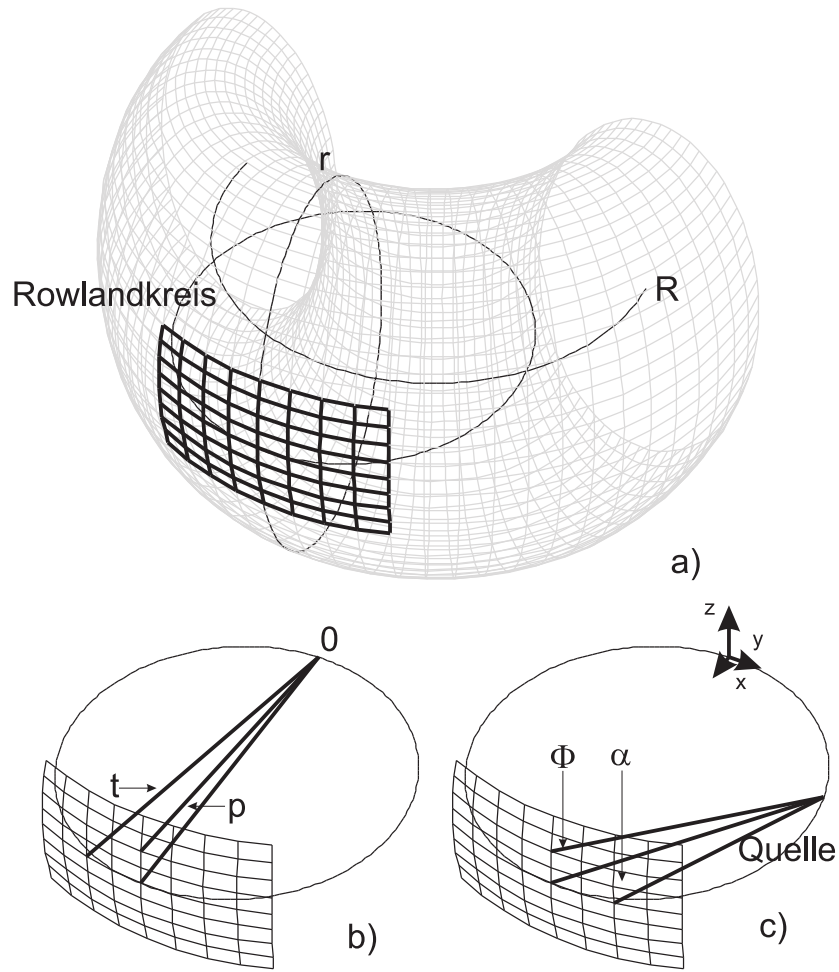
In [Vol98] wurden die  $\alpha$ -Abhängigkeit im torischen Fall erneut und unter gleichen Vorrausset-  
zungen berechnet, der quadratische Term stimmt dort nur für den Fall  $k = 1$  mit dem Term aus  
[För85] überein, für den Vorfaktor von  $\alpha^2$  wird dort eine Abhängigkeit vom Vergrößerungsfaktor  
 $k$  angegeben.

Diese bereits bekannten Formeln sind nur für symmetrische Abbildungen anwendbar, da sie  
 $R_v = R_h \sin^2 \theta_B$  voraussetzen. (Wie in Abschnitt 1.4 erläutert, ist das für Punkt-zu-Punkt  
Abbildung mit einem symmetrischen Reflex Vorraussetzung, für asymmetrische Reflexe existiert  
eine solche Bedingung nicht.)

Um mit diesen Formeln asymmetrische Reflexe zu behandeln, ist es nötig, die Einschrän-  
kungen (Einfallswinkel=Braggwinkel)  $\theta_0 = \theta_B$  sowie  $R_v/R_h = \sin^2 \theta_B$  fallenzulassen. Als  
zusätzliches Ergebnis lassen sich dann durch die Grenzwerte  $R_v \rightarrow \infty$  und  $R_h \rightarrow \infty$  die Formeln  
zur Braggwinkelabweichung für Johann- und von-Hámos-Zylinderkristalle angeben.

### 1.1.2 Rechnung

Sphäre und Zylinder können als Spezialfall des Torus mit horizontalem Krümmungsradius  $R_h$   
und vertikalem Krümmungsradius  $R_v$  angesehen werden. Die Torusoberfläche ist gegeben durch  
(Bezeichnungen und Koordinatensystem siehe Abbildung 1.1):



**Abbildung 1.1:** Geometrische Situation und Bezeichnungen am torisch gebogenen Kristall. a) Der Torus hat zwei Radien  $R$  und  $r$ . Die Ankreise im Mittelpunkt des Kristalls sind horizontal  $R_h = R + r$  und vertikal  $R_v = r$ , wobei  $R_h$  aus der Mittelebene heraus abnimmt. Um die Torusgestalt deutlich zu machen, ist ein Verhältnis  $R_v/R_h \approx 0,3$  gezeichnet, zudem ist der Kristall übertrieben groß dargestellt. Der *Rowlandkreis* liegt in horizontaler Ebene, verläuft durch Kristall- und Torusmittelpunkt und weist damit einen Radius  $R_h/2$  auf, siehe Abschnitt 1.4. b) Toroidaler Winkel  $t$  und poloidaler Winkel  $p$  parametrisieren die Torusoberfläche. c) Zeigt das Koordinatensystem sowie drei von einer Quelle ausgehende Strahlen auf die Kristalloberfläche. Die Quelle liegt allgemein in der horizontalen Ebene und ist hier für den wichtigen Spezialfall gezeichnet, dass sie auf dem Rowlandkreis liegt. Der Zentralstrahl verbindet die Quelle mit dem Mittelpunkt der Kristalloberfläche und schließt (nicht gezeichnet) den Einfallswinkel  $\theta_0$  mit der Oberfläche ein. Strahlen, die nicht auf die Mitte des Kristalls treffen, schließen mit dem Zentralstrahl horizontal bzw. vertikal die Divergenzwinkel  $\alpha$  und  $\Phi$  ein. Gezeichnet jeweils Strahlen mit positivem  $\alpha$ ,  $\Phi$ ,  $p$  und  $t$ . Vorzeichen für  $\alpha$  und  $\Phi$  wie in [För85] (Richtung von  $\alpha$  in [MUF99] irrtümlich andersherum angegeben).

$$\vec{X} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = R \begin{pmatrix} \cos(t) \\ \sin(t) \\ 0 \end{pmatrix} + r \begin{pmatrix} \cos(t) \cdot \cos(p) \\ \sin(t) \cdot \cos(p) \\ \sin(p) \end{pmatrix}.$$

Weiterhin benötigt man den Normalenvektor des Torus (in das Torusvolumen gerichtet)

$$\vec{n} = \frac{d\vec{X}}{dt} \times \frac{d\vec{X}}{dp} = R \cdot r \cdot \begin{pmatrix} \cos(t) \cdot \cos(p) \\ \sin(t) \cdot \cos(p) \\ \sin(p) \end{pmatrix} + r^2 \cdot \begin{pmatrix} \cos(t) \cdot \cos^2(p) \\ \sin(t) \cdot \cos^2(p) \\ \sin(p) \cdot \cos(p) \end{pmatrix}.$$

Die Abweichung von Einfallswinkel  $\theta_0$  zum Braggwinkel  $\theta_B$  ist der Asymmetriewinkel  $\phi$ . Es sollen nur koplanare Asymmetrien behandelt werden, d. h.  $\phi$  liegt in der horizontalen Ebene. Bei flachem Einfall,  $\theta_0 < \theta_B$  sei  $\phi$  positiv definiert (Konvention), also  $\theta_0 = \theta_B - \phi$ . Um den Einfallswinkel auf die Netzebenen zu bestimmen, benötigt man nicht den Oberflächennormalenvektor  $\vec{n}$ , sondern den der Netzebenen. Man erhält ihn durch Drehung von  $\vec{n}$  um  $\phi$  in der horizontalen Ebene. Die Drehmatrix  $D$  lautet dann

$$D = \begin{pmatrix} \cos \phi & \sin \phi & 0 \\ -\sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Der einfallende Strahl ist  $\vec{Y} = \vec{X} - \vec{r}_0$ , wobei  $\vec{r}_0 = (R_h - l_a \sin \theta_0, l_a \cos \theta_0)$ ,  $|\vec{Y}| = l_a$ . Man erhält für den Einfallswinkel

$$\cos(90^\circ - \theta_B(\alpha, \Phi)) = \sin \theta_B(\alpha, \Phi) = \frac{(D\vec{n}) \cdot \vec{Y}}{|\vec{n}| l_a},$$

$$\begin{aligned} \sin \theta_B(\alpha, \Phi) &= \sin(\theta_B + \sigma(\alpha, \Phi)) \\ &\approx \sin \theta_B + \sigma(\alpha, \Phi) \cos \theta_B \\ \sigma(\alpha, \Phi) &= \cos^{-1} \theta_B(-\sin \theta_B + \sin \theta_B(\alpha, \Phi)). \end{aligned} \tag{1.1}$$

Der Ausdruck 1.1 kann nun in eine Taylorreihe in Toruskoordinaten  $p$  und  $t$  bis zu quadratischen Termen entwickelt werden und diese Toruskoordinaten durch die Strahldivergenzen  $\alpha$  und  $\Phi$  ersetzt werden. Die Umrechnungen sind, wie man aus Abbildung 1.1 entnimmt<sup>1</sup>,

$$tR_h = \alpha l_a / \sin \theta_0 \quad pR_v = \Phi l_a.$$

Man erhält eine Reihe von Termen, die im Folgenden diskutiert werden sollen. Die Konstante  $\sigma_B$  beschreibt eine globale Winkelveränderung.

$$\sigma \approx \sigma_B + \sigma_\alpha + \sigma_{\alpha^2} + \sigma_\Phi + \sigma_{\Phi^2} + \sigma_{\alpha\Phi}.$$

<sup>1</sup>Hier ist zu beachten, dass beim Torus  $R_h = f(p)$ , jedoch ist das eine Abhängigkeit, die nur für extreme Radienverhältnisse oder sehr große Kristalle eine Rolle spielt.



Die Terme  $\sigma_\alpha$  und  $\sigma_{\alpha^2}$  nehmen etwas einfachere Gestalt an, insbesondere für die asymmetrischen Reflexe, wenn man statt der Vergrößerung  $k$  die Abweichung vom Rowlandkreis  $f_a$  einführt

$$f_a \equiv \frac{l_a}{R_h \sin \theta_0} - 1 \quad \Rightarrow \quad l_a = (1 + f_a) R_h \sin \theta_0.$$

Dabei sind, wie in [För85, Vol98],

$$\sigma_\Phi = \sigma_{\Phi\alpha} = 0,$$

es gibt keinen gemischten Term und keine lineare  $\Phi$ -Abhängigkeit der Braggwinkelabweichung. – Der Term  $\sigma_\alpha$  hängt nicht vom Asymmetriewinkel ab und ist, übereinstimmend mit [För85, Vol98]

$$\sigma_\alpha = -f_a \alpha.$$

Man erkennt, dass dieser Term verschwindet, wenn die Quelle auf dem Rowlandkreis liegt. Dass der Braggwinkel für eine Quelle auf dem Rowlandkreis nur quadratisch von den Divergenzwinkeln abhängt, erlaubt einen hohen effektiven Raumwinkel  $\Omega_{\text{eff}}$  und damit eine größere Effizienz in dieser Position.

Für  $\sigma_{\alpha^2}$  erhält man

$$\sigma_{\alpha^2} = \frac{1}{2} \left( \frac{1 - f_a}{\tan \theta_0} - f_a^2 \tan \theta_B \right) \alpha^2, \quad (1.2)$$

was sich in dem Fall, dass sich Bild und Quelle auf dem Rowlandkreis befinden, für symmetrische und asymmetrische Reflexe zu

$$\sigma_{\alpha^2} = \frac{\alpha^2}{2 \tan \theta_0}$$

vereinfacht. Das ist die Form von [För85, MUF99], die für  $f_a \neq 0$  offensichtlich im Widerspruch mit der hier hergeleiteten Form steht. In [Vol98] wird ebenfalls der symmetrische Spezialfall behandelt. Mit der Ersetzung  $x = \alpha l_a / \sin \theta_0$  lässt sich die dort gefundene Form in die von Gleichung 1.2 überführen, nicht aber in die von [För85, MUF99].

Typischerweise ist  $\sigma_{\alpha^2}$  für  $f_a \neq 0$  gegenüber  $\sigma_\alpha$  vernachlässigbar, sodass dieses Detail meist ohne praktische Bedeutung sein wird<sup>2</sup>.

Der einzige Vertikalterm ist

$$\sigma_{\Phi^2} = -\frac{\Phi^2}{2R_v^2} \left( l_a R_v \left( \cos \theta_0 - \frac{2}{\cos \theta_B} \right) + (l_a^2 + R_v^2) \tan \theta_B \right).$$

Man prüft nach, dass sich das im Spezialfall symmetrischer Reflexion und  $R_v = R_h \sin^2 \theta_B$  zu einer den Formen von [För85, MUF99] entsprechenden Gestalt hin vereinfacht

---

<sup>2</sup>Möglicherweise ist diese Abweichung auch durch andere als der hier und in [Vol98] vorgenommenen Näherungen zu erklären.

$$\sigma_{\Phi^2} = -\frac{f_a(1 + 2f_a + \cos(2\theta_0))}{2\sin(2\theta_0)}\Phi^2.$$

Damit gilt als Formel für die Braggwinkelabweichung für asymmetrische Reflexion an einem Torusstück

$$\begin{aligned} \sigma(\alpha, \Phi) \approx & \sigma_B - f_a\alpha + \frac{\alpha^2}{A} + \frac{\Phi^2}{B} = \\ & \sigma_B \\ & - f_a\alpha \\ & + \frac{1}{2} \left( \frac{1 - f_a}{\tan \theta_0} - f_a^2 \tan \theta_B \right) \alpha^2 \\ & - \frac{1}{2R_v^2} \left( l_a R_v \left( \cos \theta_0 - \frac{2}{\cos \theta_B} \right) + (l_a^2 + R_v^2) \tan \theta_B \right) \Phi^2. \end{aligned} \quad (1.3)$$

### 1.1.3 Grenzfälle des Torus

**Zylindrisch (Johann)** Die Zylinderachse liegt senkrecht zur horizontalen Ebene,  $R_v = \infty$ . Die Horizontalterme  $\sigma_\alpha$  und  $\sigma_{\alpha^2}$  bleiben unverändert,  $\sigma_{\Phi^2}$  vereinfacht sich zu

$$\sigma_{\Phi^2} = -\frac{1}{2} \tan \theta_B \Phi^2.$$

**Zylindrisch (von Hámos)** Die Zylinderachse ist parallel zur horizontalen Ebene,  $R_h = \infty$ . Der Vertikalterm bleibt unverändert,  $f_a = -1$ . Damit:

$$\sigma_\alpha = \alpha$$

$$\sigma_{\alpha^2} = \frac{1}{2} \alpha^2 \left( \tan \theta_B - \frac{2}{\tan \theta_0} \right) \ll \sigma_\alpha.$$

**Sphärisch** Aus  $R_h = R_v$  ergeben sich im allgemeinen Fall keine bemerkenswerten Vereinfachungen gegenüber dem Torus. Ist der Reflex zudem symmetrisch, erhält man die Form

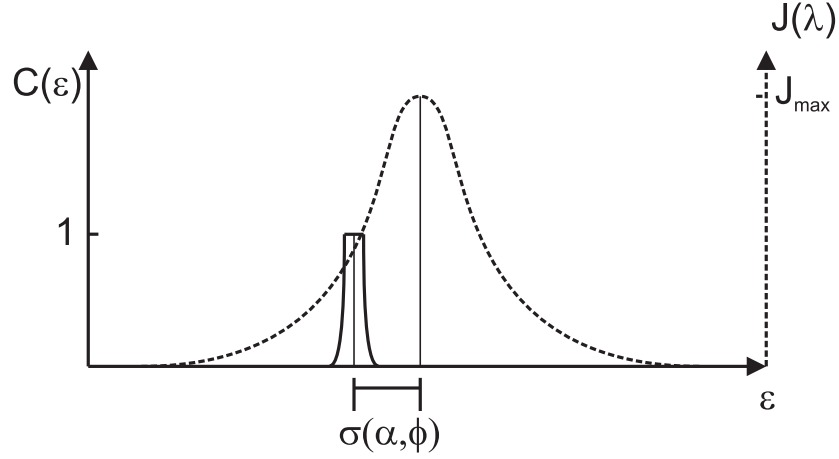
$$\sigma_{\Phi^2} = \frac{1}{4} f_a \tan \theta_B [(1 - f_a) + (1 + f_a) \cos(2\theta_B)] \Phi^2,$$

die der oben angegebenen aus [För85] entspricht.

**Eben** Hier gilt  $R_h = \infty$  und  $R_v = \infty$ . Wie oben ergibt sich

$$\begin{aligned} \sigma_\alpha &= \alpha, \\ \sigma_{\alpha^2} &= \frac{1}{2} \alpha^2 \left( \tan \theta_B - \frac{2}{\tan \theta_0} \right) \ll \sigma_\alpha \end{aligned}$$

und



**Abbildung 1.2:** Typische Situation von Reflexionskurve  $C$  zur spektralen Verteilung der Quelle  $J$ . Dabei ist  $\varepsilon = (\lambda - \lambda_0)\lambda(\partial/\partial\lambda)\theta_B$ .

$$\sigma_{\Phi^2} = -\frac{1}{2} \tan \theta_B \Phi^2.$$

## 1.2 Verallgemeinerte Effizienzformel

Die Effizienz einer Reflexion gibt den Anteil der von der Quelle erzeugten zu den am (gebogenen) Kristall gebeugten Photonen  $\frac{N_{\text{refl}}}{N_0}$  an. Nach [MUF99] gilt für eine Punktstrahlungsquelle die Intensitätsformel

$$N_{\text{refl}} = \int_{\Phi} \int_{\alpha} \int_{\lambda} G(\alpha, \Phi) J(\lambda) C \left( \sigma(\alpha, \Phi) - (\lambda - \lambda_0) \frac{\partial}{\partial \lambda} \theta_B \right) d\lambda d\alpha d\Phi \quad (1.4)$$

wobei  $J = (\partial^2 N_0)/(\partial \Omega \partial \lambda)$  die auf den Kristall einfallende spektrale Intensität pro Raumwinkel und  $C$  die Reflexionskurve des Kristalls ist. Der dimensionslose Faktor  $G(\alpha, \Phi)$  beschreibt die Winkelverteilung der Energieemission der Quelle; für Röntgenröhre und Plasmaquelle kann man ihn konstant 1 setzen, wie es auch im Folgenden geschehen soll. Mit  $\sigma(\alpha, \Phi)$  ist die Braggwinkelabweichung über die Kristalloberfläche bezeichnet, die in Abschnitt 1.1 genauer untersucht wird;  $\alpha$  und  $\Phi$  sind die horizontalen und vertikalen Divergenzwinkel der Punktquelle.

Der Braggwinkel variiert mit der Wellenlänge der Strahlung. Durch Ableiten der Bragggleichung erhält man

$$\Delta \theta_B \approx -(\lambda - \lambda_0) \frac{\partial}{\partial \lambda} \theta_B = -\frac{\lambda - \lambda_0}{\lambda_0} \tan \theta_B.$$

Diese Winkelveränderung ist für eine Linie der charakteristischen Röntgenstrahlung i. A. deutlich größer als die Breite der Reflexionskurve des gebogenen Kristalls. So ist zum Beispiel für die Cu  $K_{\alpha 1}$ -Linie bei einem Braggwinkel von  $33^\circ$  der Term  $\Delta \lambda / \lambda \tan \theta_B$  etwa 34 Winkelsekunden,

wohingegen die Reflexionskurve eines für den symmetrischen (004)-Reflex gebogenen Galliumarsenidkristalls nur 7,2 Winkelsekunden breit ist (Linienbreite nach [HFD<sup>+</sup>97], Kurvenbreite nach DIXI [HOF98]).

Ist diese Näherung einer gegen die Reflexionskurve breiten Spektrallinie gegeben, ist bei Integration über  $\lambda$  der Bereich, in dem  $C$  im Integranden ungleich 0 ist, nur ein schmaler Ausschnitt der Wellenlängenkurve  $J(\lambda)$ . Über diesen schmalen Ausschnitt kann man einen Mittelwert von  $J(\lambda)$  in Abhängigkeit der Winkel  $\alpha$  und  $\Phi$  annehmen. Für diesen Mittelwert ist der Wert von  $J$  im Zentrum der Reflexionskurve eine gute Näherung. Diese Situation ist in Abbildung 1.2 dargestellt

$$\bar{J}(\alpha, \Phi) \approx J(\lambda)|_{\lambda=\sigma(\alpha, \Phi)/(\partial/\partial\lambda)\theta_B} . \quad (1.5)$$

Durch diese Mittelung wird die  $\lambda$ -Abhängigkeit der spektralen Intensität  $J$  so auf eine Abhängigkeit vom Ort  $(\alpha, \Phi)$  auf dem Kristall umgeschrieben, dass  $\bar{J}(\alpha, \Phi)$  die Intensität der Wellenlänge ist, die an diesem Ort im Zentrum der Reflexionskurve steht. (Ein kleiner Justagewinkel  $\sigma(0, 0) = \sigma_B$  verändert diese Zuordnung.)

$$N_{\text{refl}} = \left( \frac{\partial}{\partial\lambda} \theta_B \right)^{-1} \int_{\phi} \int_{\alpha} \bar{J}(\alpha, \phi) \int_{\lambda} C(\sigma(\alpha, \phi) - (\gamma - \gamma_0)) d\gamma d\alpha d\phi,$$

wobei  $\lambda$  mit dem „Winkel“  $\gamma = \lambda(\partial/\partial\lambda)\theta_B$  substituiert wurde. Dieses Integral über  $\gamma$  ist definitionsgemäß das integrale Reflexionsvermögen eines Reflexes

$$N_{\text{refl}} = \left( \frac{\partial}{\partial\lambda} \theta_B \right)^{-1} R_{\text{int}} \int_{\phi} \int_{\alpha} \bar{J}(\alpha, \phi) d\alpha d\Phi. \quad (1.6)$$

Das Integral über den Raumwinkel kann man sich noch etwas veranschaulichen. Man betrachte einen Bereich auf dem Kristall, der erstens durch dessen äußere Abmessungen und zweitens durch Linien auf der Oberfläche begrenzt ist, entlang derer  $\bar{J}(\alpha, \phi) = 1/2 \cdot J_{\text{max}} \equiv J_{1/2}$ . Dieser Bereich ist ein *effektiver Raumwinkel*  $\Omega_{\text{eff}}$ . Das verbleibende Raumwinkelintegral über  $\bar{J}(\alpha, \phi)$  lässt sich dann umschreiben auf

$$\int_{\alpha} \int_{\phi} \bar{J}(\alpha, \Phi) d\alpha d\Phi \equiv \hat{J} \Omega_{\text{eff}}, \quad (1.7)$$

wobei sich dieser neue Wert  $\hat{J}$  zwar exakt nur über das obige Raumwinkelintegral berechnen lässt, aber auf jeden Fall kleiner als das Maximum von  $J(\lambda)$  und noch in der Größenordnung dieses Maximums liegt. Eine *untere Abschätzung* für  $\hat{J}$  ist der halbe Maximalwert  $J_{1/2}$  der Spektrallinie.  $J_{\text{max}}$  ist offensichtlich eine *obere Abschätzung* für  $\hat{J}$ .

Für eine Quelle, die  $N_0$  Photonen einer Spektrallinie mit Lorentzprofil der Halbwertbreite (FWHM)  $\Delta\lambda$  in den Raumwinkel  $\Omega_0$  abstrahlt, ist

$$J(\lambda) = \frac{\partial^2 N}{\partial\Omega\partial\lambda} = \frac{N_0}{\Omega_0} \cdot \frac{1}{\pi} \frac{\Delta\lambda/2}{(\Delta\lambda/2)^2 + (\lambda - \lambda_0)^2}.$$

Sie hat als Maximum

$$J_{\max} = 2 \frac{N_0}{\pi \Delta \lambda \Omega_0} \quad J_{1/2} = \frac{N_0}{\pi \Delta \lambda \Omega_0}.$$

Mit einem Parameter  $a$  zwischen Maximum und Minimum von  $J$  erhält man

$$\boxed{a \cdot \left( \frac{\Delta \lambda}{\lambda} \tan \theta_B \right)^{-1} \frac{\Omega_{\text{eff}}}{\Omega_0} R_{\text{int}} N_0 = N_{\text{refl}}} = (\lambda^{-1} \tan \theta_B)^{-1} R_{\text{int}} \hat{J} \Omega_{\text{eff}}, \quad (1.8)$$

wobei die oben angegebene Abschätzung ergibt, dass  $a$  für eine Spektrallinie mit Lorentzprofil zwischen  $1/\pi$  und  $2/\pi$  liegt.

Aus der dynamischen Theorie der Röntgenbeugung folgt, dass das integrale Reflexionsvermögen eines Kristalls (auch für gebogene und Mosaikkristalle) nach

$$R_{\text{int}} = \sqrt{\frac{\sin \theta_H}{\sin \theta_0}} R_{\text{int}0}$$

skaliert [Zac45], dabei ist  $R_{\text{int}0}$  das integrale Reflexionsvermögen des Reflexes bei symmetrischem Schnitt.  $\theta_0$  ist der Einfallswinkel,  $\theta_H$  der Austrittswinkel, gemessen zur Kristalloberfläche.

Bei bekannter Braggwinkelabweichung  $\sigma(\alpha, \Phi)$  lässt sich das Integral 1.7, das  $\hat{J}$  definiert, in Spezialfällen sogar analytisch ausrechnen, die entstehenden Ausdrücke sind allerdings unhandlich.

## 1.3 Formen des effektiven Raumwinkels

Mit einem Ausdruck für die Braggwinkelabweichung ist es möglich, über die Gleichungen 1.6 und 1.5 die in jedem Punkt reflektierte Gesamtintensität oder über numerische Integration die Effizienz auszurechnen.

Die volle Halbwertsbreite des Braggwinkelbereichs der Spektrallinie ist ( $\Delta \lambda$  hier die Halbwertsbreite FWHM der Spektrallinie)

$$\omega_{\Delta \lambda} = \frac{\Delta \lambda}{\lambda_0} \tan \theta_B.$$

Der effektive Raumwinkel in der Näherung dieses numerischen Integrals ist nach Gleichung 1.7 definiert als der Raumwinkelbereich von der Punktquelle her gesehen, in dem die Braggwinkelabweichung  $\sigma$  Werte von  $-\omega_{\Delta \lambda}/2$  bis  $+\omega_{\Delta \lambda}/2$  annimmt.

### 1.3.1 Entfernt vom Rowlandkreis

Entfernt vom Rowlandkreis ist in Gleichung 1.3 der Faktor  $f_a \neq 0$  und damit der Term linear in  $\alpha$  dominant ( $\Delta \alpha = \alpha_{\max} - (-\alpha_{\max})$ ).

$$-\frac{1}{2}\omega_{\Delta\lambda} < \sigma(\alpha) < \frac{1}{2}\omega_{\Delta\lambda} \quad (1.9)$$

$$|\mp f_a \alpha_{\max}| < \frac{1}{2}\omega_{\Delta\lambda} \quad (1.10)$$

$$\Delta\alpha = \frac{\omega_{\Delta\lambda}}{|f_a|} \quad (1.11)$$

$\Delta\Phi$  hingegen ist nur durch die vertikale Kristallausdehnung bestimmt,  $h$  ist die Höhe des Kristalls. Damit gilt

$$\Omega_{\text{eff}} = \Delta\alpha \cdot \Delta\Phi = \frac{\omega_{\Delta\lambda}}{|f_a|} \cdot \frac{h}{l_a}.$$

Die Form des reflektierenden Kristallgebiets ist die einer schmalen Parabel mit einer schwachen Krümmung in vertikaler Richtung. Bei Einfall von einer Quelle außerhalb des Rowlandkreises ( $f_a > 0$ ) wird auf der Seite negativer  $\alpha$  die Strahlung kürzerer Wellenlänge, auf der Seite positiver  $\alpha$  die höherer Wellenlänge reflektiert. Bei Einfall von innerhalb des Rowlandkreises ( $f_a < 0$ ) sind die Verhältnisse umgekehrt.  $\Delta\alpha$  ist typischerweise klein gegen die horizontale Kristallausdehnung.

### 1.3.2 Auf dem Rowlandkreis, symmetrischer Fall

Auf dem Rowlandkreis verschwindet aus Gleichung 1.3 sowohl der lineare Term in  $\alpha$  als auch der quadratische Term in  $\Phi$

$$\sigma = \sigma_B + \frac{1}{2 \tan \theta_0} \alpha^2.$$

Damit der Bereich  $-\omega_{\Delta\lambda}/2$  bis  $+\omega_{\Delta\lambda}/2$  überstrichen wird, sei  $\sigma_B = -\omega_{\Delta\lambda}/2$ , damit

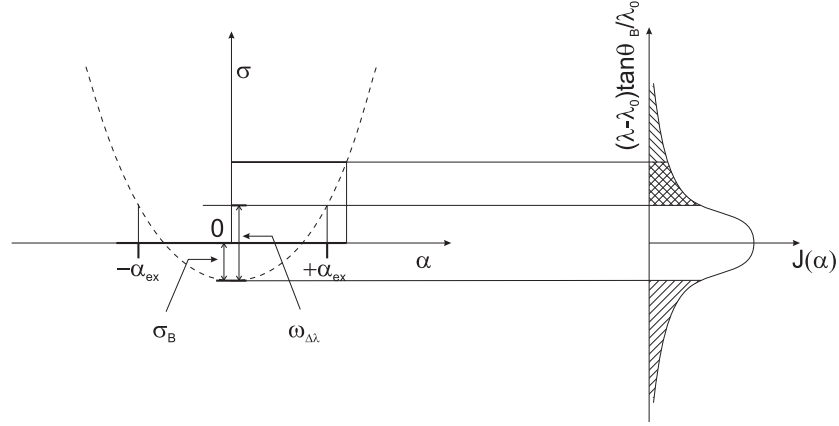
$$\begin{aligned} \frac{1}{2 \tan \theta_0} \alpha_{\text{ex}}^2 &= \omega_{\Delta\lambda} \\ \alpha_{\text{ex}} &= \pm \sqrt{2\omega_{\Delta\lambda} \tan \theta_0} \\ \Delta\alpha &= 2\sqrt{2\omega_{\Delta\lambda} \tan \theta_0}. \end{aligned}$$

$\Delta\Phi$  ist wieder nur durch die vertikale Kristallausdehnung bestimmt.

$$\Omega_{\text{eff}} = \Delta\alpha \cdot \Delta\Phi = 2\sqrt{2\omega_{\Delta\lambda} \tan \theta_0} \cdot \frac{h}{l_a}$$

Da  $\omega_{\Delta\lambda}$  in der Größenordnung  $10^{-4}$  ist, ist das deutlich mehr als für den Fall außerhalb des Rowlandkreises.

Die Form des Reflexionsgebiets ist ein Rechteck auf der Kristalloberfläche,  $2\alpha_{\text{ex}}$  ist ein Maß für eine sinnvolle Kristallbreite. Auf der vertikalen Mittellinie des Kristalls wird als kürzeste Wellenlänge jene am Halbwert der kurzwelligen Flanke der Spektrallinie reflektiert. Auf den rechten und linken Kanten des Rechtecks, bei  $\pm\alpha_{\text{ex}}$ , wird die Wellenlänge am Halbwert der



**Abbildung 1.3:** Schema zur symmetrischen Reflexion auf dem Rowlandkreis. Konstanter und quadratischer Anteil der Braggwinkelabweichung  $\sigma$  sind gezeichnet, für alle Werte  $\Phi$  der Vertikaldivergenz ergibt sich das gleiche Bild. Der konstante Anteil  $\sigma_B$  ist so gewählt, dass um den Kristallmittelpunkt die Linienbreite  $\omega_{\Delta\lambda}$  ausgenutzt wird. – Die rechte Bildseite zeigt, welche Wellenlänge im Maximum der Reflexionskurve auf einem bestimmten Kristallbereich liegt. Die einfach schraffierten Wellenlängen (oben lang-, unten kurzwellig) kommen nicht zur Reflexion, die doppelt schraffierten nur in den Randbereichen eines Kristalls, der soweit größer ist als  $2\alpha_{ex}$  ist, wie die starke Linie auf der  $\alpha$ -Skala andeutet. – Man erkennt, dass für  $\sigma_B = 0$  die Hälfte des einfallenden Spektrums ausgeblendet wird und dass Fokussierung in einer solchen Geometrie stets die Linienform beeinflusst.

langwelligen Kante der Spektrallinie reflektiert. Diese Verhältnisse sind in Abbildung 1.3 skizziert.

### 1.3.3 Auf dem Rowlandkreis, asymmetrischer Fall

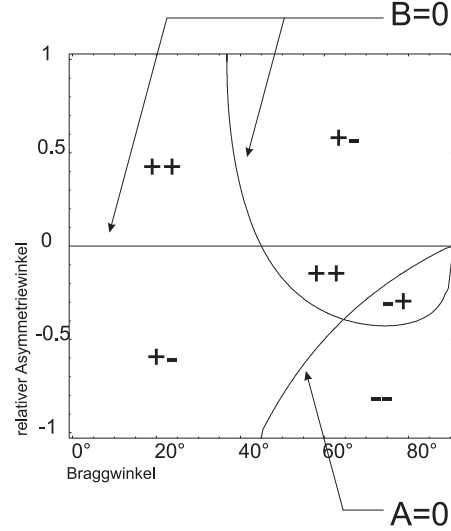
Im asymmetrischen Fall verschwindet der Term  $\sigma_{\Phi^2}$  nicht mehr. Die Braggwinkelabweichung ist in diesem Fall, mit den Abkürzungen  $A^2$  und  $B^2$ , die aus Gleichung 1.3 folgen ( $f_a = 0$ )

$$\sigma = \sigma_B + \frac{\alpha^2}{A} + \frac{\Phi^2}{B}.$$

Man erkennt, dass eine Linie mit konstantem  $\sigma$  auf dem Kristall abhängig von den Vorzeichen von  $A$  und  $B$  eine Ellipse oder eine Hyperbel ist.

In Abbildung 1.4 sind für alle asymmetrischen Reflexe auf dem Rowlandkreis diese beiden Vorzeichen angegeben. Angenommen wurde ein Radienverhältnis  $R_v/R_h = \sin \theta_0 \sin \theta_H$  (siehe Abschnitt 1.4).

Die in der Abbildung aufgezeichnete ( $A = 0$ )-Linie entspricht senkrechtem Einfall, die gerade ( $B = 0$ )-Linie ist der symmetrische Fall, der im vorhergehenden Abschnitt beschrieben wurde. Der Punkt, in dem die ( $A = 0$ )-Linie die geschwungene ( $B = 0$ )-Linie schneidet, könnte interessant für intensive Fokussierung sein, da in ihm  $\sigma$  in quadratischer Näherung verschwindet.



**Abbildung 1.4:** Vorzeichen der  $\alpha^2$ - und  $\Phi^2$ -Faktoren  $A$  und  $B$  für beliebige asymmetrische Reflexionen.

Für einen Braggwinkel  $\theta_B$  sind Asymmetriewinkel  $-\theta_B < \phi < \theta_B$  möglich; aufgezeichnet ist ein „relativer Asymmetriewinkel“  $\phi/\theta_B$ . Das Gebiet ist durch 2 Linien mit  $B = 0$  und einer mit  $A = 0$  in 6 Bereiche aufgeteilt, die jeweils mit den Vorzeichen von  $A$  und  $B$  (in dieser Reihenfolge) markiert sind.

(Abbildungsparameter:  $R_v/R_h = 0,63$ ,  $\theta_B - \phi = 90^\circ$ ,  $\theta_B + \phi = 26^\circ$ ,  $\theta_B = 64^\circ$ .)

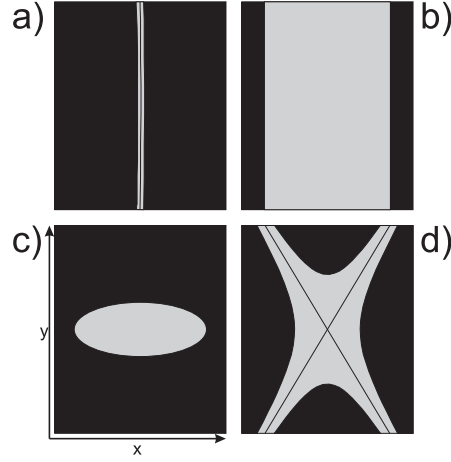
**Bereiche gleichen Vorzeichens** Wie oben  $\sigma_B = \mp\omega_{\Delta\lambda}/2$ , die Linie  $\sigma = \pm\omega_{\Delta\lambda}/2$  beschreibt eine Ellipse mit Halbachsen  $\sqrt{|A|}$  und  $\sqrt{|B|}$ . Im Mittelpunkt der Ellipse wird die kurzwelligste Strahlung im Fall  $(++)$ , die langwelligste im Fall  $(--)$  reflektiert.

**Bereiche verschiedenen Vorzeichens** Wählt man  $\sigma_B = 0$  entstehen zwei Geraden  $\sigma = 0$ , die sich im Kristallmittelpunkt schneiden. Sie sind die Asymptoten der beiden konjugierten Hyperbeln  $\sigma = \pm\omega_{\Delta\lambda}/2$ , deren insgesamt vier Äste das effektiv reflektierende Gebiet zusammen mit den Kristallkanten begrenzen. Die Größe  $\Delta x/\Delta y$  beschreibt das Verhältnis vom Abstand der horizontalen Scheitelpunkte zum Abstand der vertikalen Scheitelpunkte (der konjugierten Hyperbeläste) und gibt damit an, welches Höhen-Breiten-Verhältnis des Kristalls sinnvoll ist

$$\frac{\Delta x}{\Delta y} = \frac{|B|}{|C| \sin^2 \theta_0}.$$

Die Form der möglichen effektiven Raumwinkelbereiche ist zusammenfassend schematisch in Abbildung 1.5 dargestellt. Hohe Effizienzen sind nur auf dem Rowlandkreis zu erwarten. In dieser quadratischen Näherungen sind deutliche Unterschiede zwischen symmetrischer und asymmetrischer Reflexion zu erkennen. In symmetrischer Geometrie tauchen nur die Formen *a)* und *b)* auf, nicht aber *c)* und *d)*, weil in Rowlandkreisgeometrie bei symmetrischer Reflexion stets  $B = 0$  gilt. Auch für symmetrische Reflexionen tauchen bei numerischer Rechnung (siehe





**Abbildung 1.5:** Mögliche Formen des effektiven Raumwinkels auf dem Kristall in *quadratischer Näherung*: a) Außerhalb des Rowlandkreises, sowohl symmetrisch als auch asymmetrisch, Krümmung des Gebiets schwach und in beiden Richtungen möglich. b) Auf dem Rowlandkreis, symmetrischer Fall. c) Auf dem Rowlandkreis, asymmetrischer Fall, Vorzeichen von  $A$  und  $B$  gleich. d) Auf dem Rowlandkreis, asymmetrischer Fall, Vorzeichen von  $A$  und  $B$  verschieden.

z. B. [MUF99]) effektive Raumwinkel auf, die den Formen c) und d) ähneln. Das geschieht jedoch erst für deutlich größere Werte von  $\Phi$  bzw.  $y$ .

### 1.3.4 Schlussfolgerungen

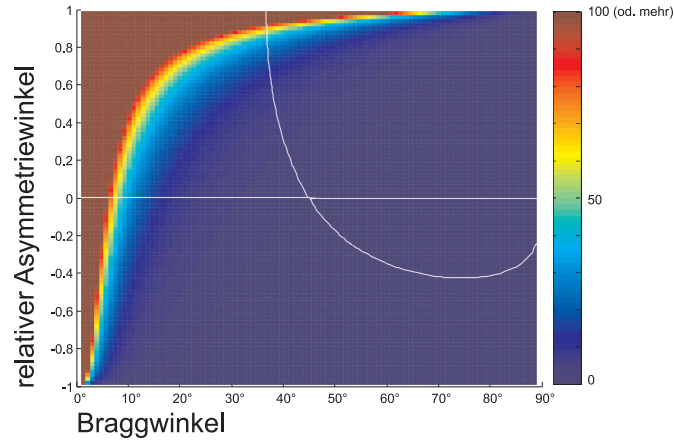
Um eine photoneneffiziente Abbildung zu erhalten, ist es immer notwendig, Quelle und Fokus *auf dem Rowlandkreis* zu platzieren, weil sonst der lineare Term der Braggwinkelabweichung dominiert und der effektive Raumwinkel klein wird.

Außer in der Nähe der Nullstellen der Funktion  $B(\theta_B, \phi)$  (siehe Abbildung 1.4) sind asymmetrische Reflexionen deswegen gegenüber symmetrischen Reflexionen mit gleichem Braggwinkel benachteiligt, weil die Ellipsen- und Hyperbelformen c) und d) in Abbildung 1.5 kleinere effektive Raumwinkel bedingen.

Man kann die Effizienzformel 1.8 für den Fall, dass die Quelle auf dem Rowlandkreis ist, in drei Faktoren zerlegen, wobei der erste Reflex und Quelle beschreibt und der zweite die reflektierende Kristalloberfläche angibt. Der dritte Faktor ist ein reiner Geometriefaktor. ( $A_{\text{eff}}$  ist die Fläche (m<sup>2</sup>) auf dem Kristall, die dem Raumwinkel  $\Omega_{\text{eff}}$  (sr) entspricht.)

$$\frac{N_{\text{refl}}}{N_0} = a \frac{R_{\text{int}0}}{\Omega_0(\Delta\lambda/\lambda)} \cdot \frac{A_{\text{eff}}}{R_h^2} \cdot \frac{\sqrt{\sin\theta_H/\sin\theta_0}}{\tan\theta_B \sin\theta_0} \quad (1.12)$$

Dieser Geometriefaktor ist in Abbildung 1.6 dargestellt. Man erkennt, dass für große Asymmetriewinkel  $\phi$  dieser Faktor bis zu eine Größenordnung größer sein kann als der entsprechende Wert bei  $\phi = 0$ . Wie in Abschnitt 1.3 erläutert, sinkt im asymmetrischen Fall die reflektierende



**Abbildung 1.6:** Geometriefaktor aus Gleichung 1.12. Der relative Asymmetriewinkel  $\phi/\theta_B$  ist positiv für flachen Einfall. Der dargestellte geometrische Term ist proportional zur Effizienz der Kristallreflexion in Abhängigkeit des Asymmetriewinkels. Dargestellt ist die Linie  $B = 0$  aus Abbildung 1.4, bei der der vertikale quadratische Term der Braggwinkelabweichung  $\sigma$  verschwindet.

Fläche  $A_{\text{eff}}$  durch ihre ungünstige Form. Entlang der Linie  $B = 0$ , die ebenfalls in Abbildung 1.6 dargestellt ist (siehe auch Abbildung 1.4), ist dieser Nachteil allerdings aufgehoben.

Die asymmetrischen Reflexionen bringen also entfernt von der Linie  $B = 0$  höchstens geringe Effizienzvorteile gegenüber symmetrischen Reflexionen. Es wurde darauf hingewiesen, dass bei senkrechtem Einfall (aber  $\theta_B < 90^\circ$ ) die quadratische Abhängigkeit von  $\alpha$  in der für asymmetrische Reflexionen neu hergeleiteten Braggwinkelabweichung (siehe Abschnitt 1.1) verschwindet. Besonders interessant ist diese Eigenschaft für  $\theta_B = 64^\circ$ , denn dort verschwindet ebenfalls die quadratische  $\Phi$ -Abhängigkeit. Dies könnte deutlich größere effektive Raumwinkel als bei symmetrischen Kristallen ermöglichen.

## 1.4 Fokussierung

Im vorhergehenden Abschnitt wurde die reflektierte Intensität betrachtet, nicht aber der Orte, an den sie fokussiert wird.

### 1.4.1 Polychromatischer und monochromatischer Fokus

Wird ein Röntgenstrahl symmetrisch reflektiert, trifft der Strahl unter dem Braggwinkel auf die Netzebenen und die Oberfläche, die parallel zueinander sind. Einfalls- und Austrittswinkel sind sowohl bezüglich der Netzebenen als auch der Oberfläche gleich. Im asymmetrischen Fall ist das offensichtlich nicht gegenüber der Oberfläche der Fall, aber auch gegenüber den Netzebenen nicht.

So wird in [CK92] hergeleitet, dass ( $b$  Asymmetriefaktor,  $\theta_0$  Einfalls-,  $\theta_H$  Ausfallswinkel, beide

zur Oberfläche gemessen)

$$\sigma_H = \frac{\sin \theta_0}{\sin \theta_H} \sigma = b\sigma, \quad (1.13)$$

also die Abweichung vom Braggwinkel beim Einfall eine andere ist als die beim Ausfall. Der Einfallswinkel ist also *nicht* gleich dem Austrittswinkel an den Netzebenen. Dies wird bei dem in der Arbeitsgruppe verwendeten Strahlverfolgungsprogramm T-Ray [Dir97, Vol98] allerdings vorausgesetzt, was es, wie in [Vol98] erwähnt, für die Strahlverfolgung asymmetrischer Reflexe ungeeignet macht.

Eine einfache Änderung des Programms ist nicht möglich, weil es einen Strahl als Bündelung von Strahlen eines Wellenlängenspektrums begreift. Eine Reflexion ändert die Intensitäten der spektralen Komponenten und die Richtung des einen Strahls. Da die Ausfallsrichtung aber nicht durch die Einfallsrichtung vollständig bestimmt ist, sondern auch von  $\lambda$  abhängt ( $\sigma(\theta_B(\lambda))$ ) ist der ausfallende „Strahl“ ein Bündel. Das heißt, dass die Behandlung von T-Ray chromatische Aberrationen ignoriert, die bei asymmetrischen Reflexen auftreten können (experimentell nachgewiesen z. B. durch [Tak95]).

Um nun den Ort zu bestimmen, an den eine Quelle durch den asymmetrischen Reflex am gebogenen Kristall abgebildet wird, kann man in Gleichung 1.13 den Asymmetriefaktor dennoch 1 setzen oder den „richtigen“ Asymmetriefaktor  $b$  einsetzen. Die erste Fokusposition nennt man den *polychromatischen Fokus*, die zweite den *monochromatischen Fokus*.

Der monochromatische horizontale Fokus einer Punktquelle an einem gebogenem Kristall mit Krümmungsradius  $R_h$  ist, nach [CK92],

$$\frac{\sin \theta_0 + \sin \theta_H}{R_h} = \frac{\sin^2 \theta_0}{l_a} + \frac{\sin^2 \theta_H}{l_b},$$

und der polychromatische horizontale Fokus, angegeben z. B. in [CK92, PWF01],

$$\frac{2}{R_h} = \frac{\sin \theta_0}{l_a} + \frac{\sin \theta_H}{l_b}. \quad (1.14)$$

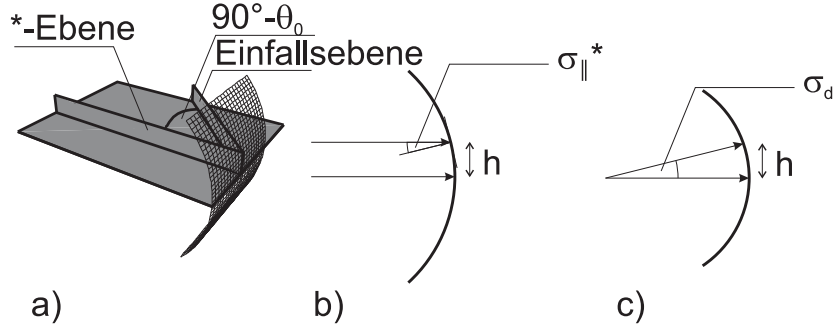
**Der vertikale monochromatische Fokus** lässt sich nach dem in [CK92] angegebenen Verfahren bestimmen (siehe auch Abbildung 1.7), ist dort aber nicht angegeben.

Für parallel einfallende Strahlung ist die Variation des Einfallswinkels in der Ebene der vertikalen Krümmung  $\sigma_{\parallel}^*$ , seine Projektion in die Einfallsebene ist  $\sigma_{\parallel}$

$$\begin{aligned} \sigma_{\parallel}^* &= \frac{h}{R_v}, \\ \sigma_{\parallel} &= \sigma_{\parallel}^* \cos(\pi/2 - \theta_0) = \frac{h}{R_v} \sin \theta_0. \end{aligned} \quad (1.15)$$

Für Strahlung aus einer Punktquelle in einer Entfernung von  $l_a$  kommt der Term

$$\sigma_d = -\frac{h}{l_a}$$



**Abbildung 1.7:** Monochromatischer Fokus in der vertikalen Ebene. a) vertikale Ebene, Kristall hier mit einem unendlichen Horizontalradius gezeichnet. Mit einem Stern ist der Schnitt von Teilabbildung b) markiert. Teilabbildung c) liegt in der Einfallsebene. In b) ist die Projektion von paralleler Strahlung in der Einfallsebene, in c) divergente Strahlung in der Einfallsebene gezeichnet.

hinzu. Mit Gleichung 1.13 gilt

$$b \left( \frac{h}{R_v} \sin \theta_0 - \frac{h}{l_a} \right) = -\frac{h}{R_v} \sin \theta_H + \frac{h}{l_b}.$$

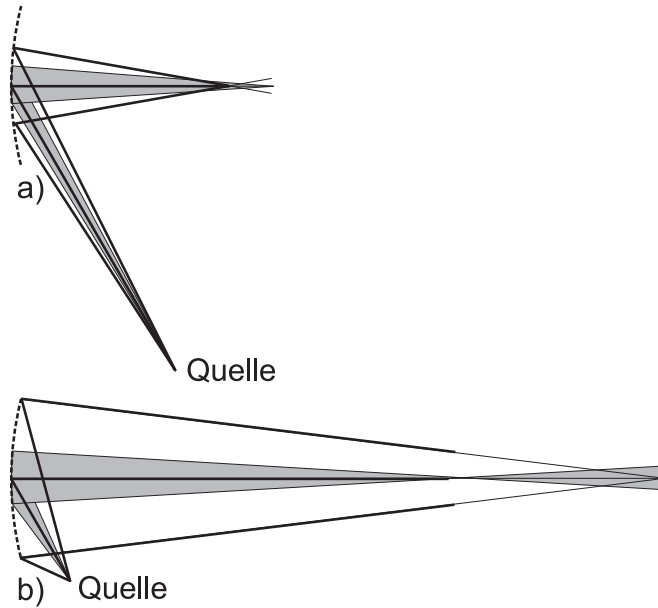
Wie im horizontalen Fall erhält man mit  $b = 1$  den polychromatischen Fokus und mit  $b = \sin \theta_0 / \sin \theta_H$  den monochromatischen Fokus.

$$\frac{\sin \theta_0 + \sin \theta_H}{R_v} = \frac{1}{l_a} + \frac{1}{l_b} \quad \text{polychromatisch [PWF01]} \quad (1.16)$$

$$\frac{\sin^2 \theta_0 + \sin^2 \theta_H}{R_v} = \frac{\sin \theta_0}{l_a} + \frac{\sin \theta_H}{l_b} \quad \text{monochromatisch} \quad (1.17)$$

Setzt man die Bedingung ein, dass der Quellpunkt sich auf dem Rowlandkreis ( $l_a = R_h \sin \theta_0$ ) befindet und der Kristall so gebogen ist, dass der polychromatische Fokus ebenfalls auf dem Rowlandkreis liegt ( $R_v/R_h = \sin \theta_0 \sin \theta_H$ , siehe unten), findet man, dass horizontaler mono- und polychromatischer und vertikaler polychromatischer Fokus zusammenfallen; der monochromatische Vertikalfokus liegt allerdings i. A. anderswo. *Das heißt, dass selbst in Rowlandkreisgeometrie in vertikaler Richtung chromatische Aberrationen auftreten.*

**Der Übergang von monochromatischem zu polychromatischem Fokus** ist in Abbildung 1.8 dargestellt. Dort ist angenommen, dass die Quelle in beiden dargestellten Fällen nur drei diskrete und nah beieinander liegende Wellenlängen anstatt eines kontinuierlichen Linienspektrums in den Raumwinkel emittiert. Für die drei Wellenlängen ist die Braggbedingung jeweils an einem bestimmten Einfallswinkel auf dem Kristall exakt erfüllt (durchgezogene Linien). Um diesen Winkel herum reflektiert der Kristall an den Flanken der Reflexionskurve und fokussiert monochromatisch (hellgrauer Bereich). Dieser hellgraue Bereich ist zur besseren Übersicht jeweils nur für den Strahl bei der zentralen Wellenlänge gezeichnet.



**Abbildung 1.8:** Monochromatischer und polychromatischer Fokus (in der horizontalen Ebene). In beiden Fällen: Einfallswinkel  $30^\circ$ , Ausfallswinkel  $90^\circ$ . Parameter  $f_a = 1$  für a) und  $f_a = -1/3$  in b). Im Fall a) liegt der polychromatische Fokus (fett) vor dem monochromatischen, im Fall b) liegt der monochromatische (fett) vor dem polychromatischen.

Der monochromatische Fokus dominiert also, wenn der Effekt nach Gleichung 1.13 gegenüber der Veränderung des Braggwinkels durch die spektrale Breite dominiert, wenn also ( $\delta$  hier Breite der Reflexionskurve)

$$\delta > \frac{\Delta\lambda}{\lambda} \tan \theta_B.$$

Eine Linie der charakteristischen Röntgenstrahlung ist typischerweise deutlich breiter als die Reflexionskurve, jedoch entstehen chromatische Fehler. Deren Größe kann man abschätzen, indem man untersucht, wie groß der Bereich auf dem Kristall ist, in dem die Braggwinkelabweichung  $\sigma$  in der Größenordnung der Reflexionskurvenbreite variiert und eine Konstruktion wie in Abbildung 1.8 durchführt.

### 1.4.2 Bedingungen für Punkt-zu-Punkt-Fokussierung

Für symmetrische Reflexe fallen mono- und polychromatischer Fokus stets zusammen, die spezialisierten Abbildungsgleichungen sind [För85, DR<sup>+</sup>95, MUF99]

$$\frac{1}{l_a} + \frac{1}{l_b} = \frac{2}{R_h \sin \theta_0},$$

horizontal und

$$\frac{1}{l_a} + \frac{1}{l_b} = \frac{2 \sin \theta_0}{R_v}$$

vertikal, die offensichtlich dann für jedes  $l_a$  zusammenfallen, wenn

$$\frac{R_v}{R_h} = \sin^2 \theta_B.$$

Der gebogene Kristall fokussiert also von Punkt zu Punkt, solange ein fester symmetrischer Braggwinkel (und damit eine feste Wellenlänge) eingehalten wird (bis auf geometrische Abbildungsfehler).

Möchte man auch im asymmetrischen Fall mit der Quelle auf dem Rowlandkreis einen Punktfokus realisieren, folgt als Radienverhältnis ( $l_b = R_h \sin \theta_H$  eingesetzt in Gleichung 1.16)

$$\frac{R_v}{R_h} = \sin \theta_0 \sin \theta_H.$$

Der Maßstab ist dann  $k = \sin \theta_H / \sin \theta_0$ . Für polychromatische Fokussierungen außerhalb des Rowlandkreises erhält man aus den Abbildungsgleichungen 1.14 eine deutlich kompliziertere Bedingung für einen Punktfokus ( $k = l_b/l_a$  Abbildungsmaßstab) als im symmetrischen Fall.

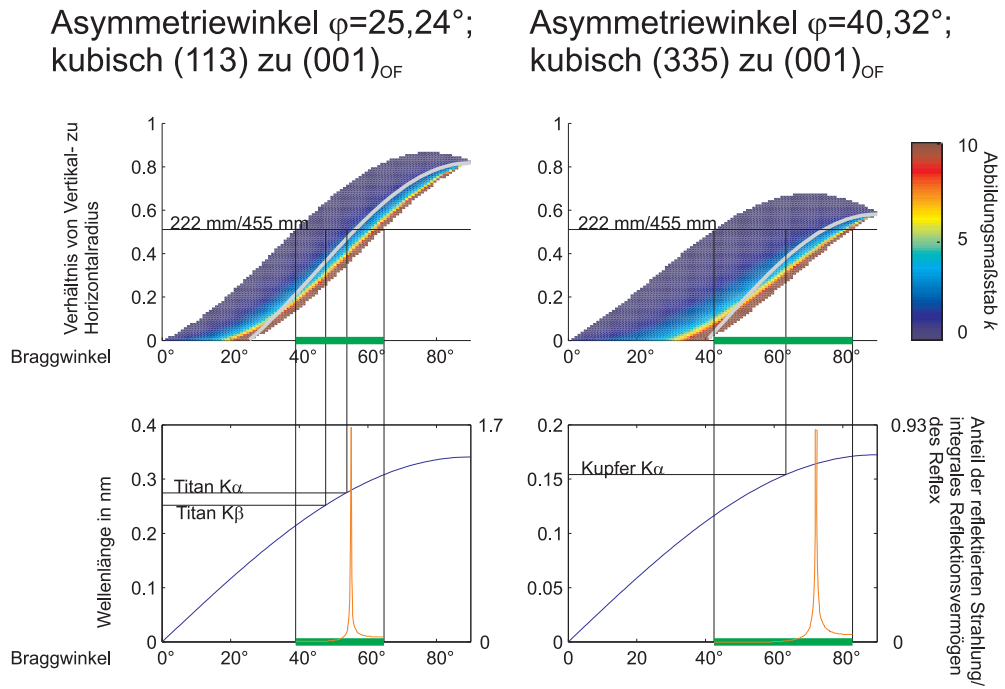
$$k = -\frac{-2R_v/R_H + \sin \theta_0 \sin \theta_H + \sin^2 \theta_H}{-2R_v/R_H + \sin \theta_0 \sin \theta_H + \sin^2 \theta_0}, \quad (1.18)$$

Für  $k > 0$  ist eine reelle Punkt-zu-Punkt-Abbildung möglich. Geht man mit dem für Winkel und Radienverhältnisse bestimmten  $k$  in die Abbildungsgleichungen erhält man genau ein Paar Quell- und Fokusabstand  $l_a, l_b$ . Für das in Abschnitt 3.1 genauer beschriebene Experiment wurde ein Kristall verwendet, für den Asymmetriewinkel  $\pm 25,24^\circ$  und  $\pm 40,32^\circ$  einfach realisierbar waren. Für diese beiden Asymmetriewinkel sind in Abbildung 1.9 mögliche Braggwinkel und Radienverhältnisse dargestellt.

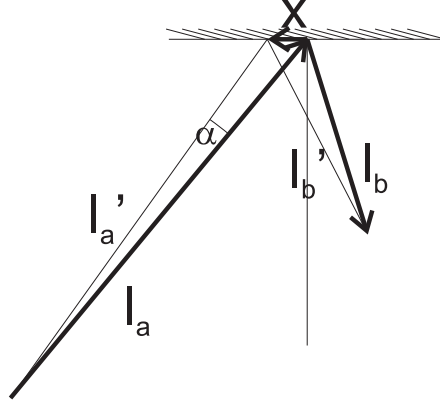
Man erkennt in der Abbildung, dass für kleinere Radienverhältnisse Punkt-zu-Punkt-Abbildungen über einen breiten Winkelbereich, und somit über die Bragggleichung einen ausgedehnten Bereich von Wellenlängen, *mit einem einzigen Kristall* möglich sind. Da man sich vom Rowlandkreis wegbewegt, verliert man allerdings deutlich an Intensität.

Häufig wird praktisch bei der Herstellung der Kristallform das ideale Radienverhältnis  $R_v/R_h$  einer speziellen Anwendung nur ungenau erfüllt. Beispielsweise sollte der Kristall mit der laufenden Nummer 167 Strahlung unter einem Braggwinkel von  $76,6^\circ$  symmetrisch reflektieren, hatte aber durch Ungenauigkeiten bei der Herstellung der Form ein etwas falsches Radienverhältnis ( $R_v/R_h$  ist 0,973 statt 0,946). Das hat zur Folge, dass der gebogene Kristall in Rowlandkreisgeometrie nach Gleichungen 1.14, 1.16 ( $\theta_0 = \theta_B, l_a = R_h \sin \theta_B, \theta_B = 76,6^\circ, R_h = 401,47 \text{ mm}$ ) zwei um 8,2 mm voneinander entfernte Strichfoki hat<sup>3</sup>. Der Ausgleichsfokus dazwischen ist dann, in diesem Beispiel, wenn das reflektierende Kristallgebiet  $10 \times 10 \text{ mm}$  groß ist rein geometrisch mit  $50 \times 50 \mu\text{m}$  (!) schon über die übliche Größenordnung von Aberrationen ( $< 10 \mu\text{m}$ ) verbreitert.

<sup>3</sup>Für diesen Reflex wurden mehrere Formen hergestellt, von denen andere besser angepasste Radienverhältnisse haben. Technisch sind bessere Radienverhältnisse routinemäßig möglich [Weh07].



**Abbildung 1.9:** *Oben:* Abbildungsmaßstäbe für polychromatischen Fokus für zwei verschiedene Asymmetriewinkel. In der Abszisse ist der Bereich möglicher Abbildungen (Maßstab  $k$  aus Gleichung 1.18 positiv) grün markiert. Der Einfallswinkel ist der aufgetragene Braggwinkel minus Asymmetriewinkel  $\phi$ . Für steilen Einfall erhält man eine Abbildung mit dem Kehrwert des dargestellten Abbildungsmaßstabes. Der Spezialfall, in dem Quelle und Bild auf dem Rowlandkreis liegen, ist grau markiert. 222/455 ist das Radienverhältnis des verwendeten Kristalls. *Unten:* Den Braggwinkeln für (133) bzw. (335) Reflexion an GaAs entsprechende Wellenlängen (blau) und Effizienzen (orange).



**Abbildung 1.10:** Verschiedene Wege bei asymmetrischer Fokussierung. Der gebogene Kristall ist für die geometrische Abschätzung flach gezeichnet. Der schwach gedruckte Weg (gestrichene Größen) ist kürzer.

Für asymmetrische Reflexe könnte zumindest in der Nähe des Rowlandkreises wieder eine Position gefunden werden, auf der horizontaler und vertikaler Fokus zusammentreffen<sup>4</sup>.

**Röntgenpulse mit „chirp“** Im Gegensatz zu symmetrischer Fokussierung legen bei asymmetrischer Fokussierung die Strahlen mit verschiedenen horizontalen Divergenzwinkeln  $\alpha$  verschiedene Wege zurück. Abbildung 1.10 veranschaulicht dies. Eine Abschätzung der Wegdifferenz erhält man, indem man annimmt, dass die Kristalloberfläche eben ist und  $x/l_a \ll 1$ ,  $x/l_b \ll 1$ .

$$\Delta s = l'_a + l'_b - (l_a + l_b) \approx x(\cos \theta_0 - \cos \theta_H) \quad (1.19)$$

Die zurückgelegte Weglänge und damit die vergangene Zeit (1 mm entspricht 3,3 ps) ist aus der Winkelverteilung im Fokus erkennbar. Diese Information wird durch die Probe (z. B. für Braggreflexion an einem Mosaikkristall) aber möglicherweise zerstört.

Verwendet man einen asymmetrischen Reflex so, dass die Quelle vom Rowlandkreis entfernt ist ( $f_a \neq 0$ ), so ist die am gebogenen Kristall im Zentrum der schmalen Reflexionskurve reflektierte Wellenlänge linear mit der Position verbunden.

$$\frac{\lambda}{\lambda_0} \theta_B = \sigma \approx -f_a \alpha = -f_a \frac{x \sin \theta_0}{(1 + f_a) R_h}$$

Das bedeutet, dass der gebogene Kristall aus einem kurzen Röntgenpuls mit kontinuierlichen Spektrum einen „gechirpten“ Puls macht.

<sup>4</sup>Für das Projekt CORA ist diese Überlegung allerdings nicht von Belang, da dort keine derart hohen Ansprüche an das Auflösungsvermögen gestellt wird (siehe Abschnitt 2.1).



## 2 Auswahl gebogener Kristalle für das Projekt CORA

Für das Projekt CORA soll für die harte Röntgenstrahlung, die in zwei Targetmaterialien (an Fe und Cu) durch die Laser-Plasma-Interaktion entsteht, jeweils die  $K_{\alpha 1}$ -Linie, die intensivste Linie der charakteristischen Strahlung, auf eine Probe fokussiert werden. Dort werden Photoelektronen ausgeschlagen, deren Energie untersucht werden soll. Es werden Eigenschaften und Anforderungen diskutiert, und der Auswahlprozess wird dargestellt.

### 2.1 Wichtige Eigenschaften

Neben der Effizienz, deren Berechnung in Abschnitt 1.2 beschrieben wird und die das wichtigste Auswahlkriterium ist, sind noch einige andere Eigenschaften wichtig.

**Bandbreite** In der Photoelektronenspektroskopie [Cha92] schlägt ein Röntgenphoton in der Probenoberfläche ein Elektron heraus, dessen kinetische Energie gemessen wird. Die Energiebilanz für das herausgeschlagene Elektron lautet

$$E_{\text{kin}} = E_{\text{phot}} - E_{\text{bind}}.$$

Damit also die Bindungsenergie der herausgeschlagenen Elektronen bestimmt werden kann, ist es nötig, die Photonenenergie genau zu kennen.

Die stärksten charakteristischen Linien sind die  $K_{\alpha 1,2}$ -Linien, die für Eisen 13 eV und für Kupfer 20 eV voneinander entfernt sind. Die Breite der  $K_{\alpha 1}$ -Linie ist 2,55 eV für Cu und 2,35 eV<sup>1</sup> für Eisen [HFD<sup>+</sup>97]. Für die angestrebte Genauigkeit ist es nicht akzeptabel, die Photonen der  $K_{\alpha 2}$ -Linie mit zu reflektieren, sodass eine spektrale Selektion, die ausschließlich die  $K_{\alpha 1}$ -Linie erfasst, wünschenswert ist,  $\Delta E/E < 10^{-3}$ .

**Räumliche Auflösung** Durch die Abbildung der am Plasma entstehenden Röntgenstrahlung auf die Probe sollte diese die Quelle nicht wesentlich vergrößern oder durch starke Aberrationen verbreitern. Die Quelle der Röntgenstrahlung hat eine Ausdehnung von etwa 80 bis 100  $\mu\text{m}$ .

Wie in Abschnitt 1.3.4 dargelegt, sollte die Quelle für hohe Photonen-effizienz stets auf dem Rowlandkreis liegen. Das bedeutet, dass der Abbildungsmaßstab

---

<sup>1</sup>Diese Daten wurden für Strahlung aus einer Röntgenröhre bestimmt.

$$k = \frac{\sin \theta_H}{\sin \theta_0} = \frac{\sin(\theta_B + \phi)}{\sin(\theta_B - \phi)}$$

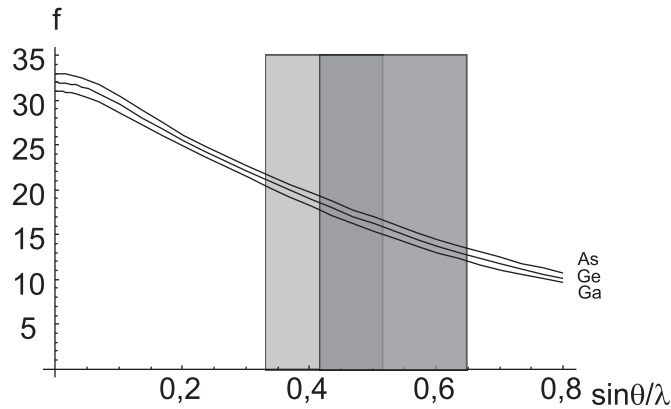
sein muss ( $k = 1$  für symmetrische Reflexionen). Wie ebenfalls in Abschnitt 1.3.4 gezeigt, kommt nur symmetrischer oder flacher Einfall für hocheffiziente Reflexion in Frage,  $k$  ist also  $\geq 1$ .  $k > 1$  ist ein deutlicher Nachteil für die räumliche Auflösung. Die Frage, ob eine mögliche Intensitätssteigerung diesen Nachteil aufwiegt, muss im Einzelfall geklärt werden.

Fokussierung an torisch gebogenen Kristallen erzeugt auf Grund der Abweichung vom idealen Rotationsellipsoid geometrische Aberrationen [Dir97, PWF01], asymmetrische Reflexion zusätzlich chromatische Aberrationen [CK92, Tak95]. Diese bestimmt man, indem man die Ausdehnung des Fokusflecks einer Punktquelle bestimmt; das Bild einer achsnah ausgedehnten Quelle ist dann die räumliche Faltung dieser Quelle mit dem Fokusfleck der Punktquelle. Für typische Geometrien ist diese Ausdehnung des Fokusflecks einer Punktquelle im unteren Mikrometerbereich, also für die Kristallauswahl unerheblich. Es reicht also, die jeweils als am Effizientesten erkannten Reflexgeometrien mittels Strahlverfolgung auf Aberration  $< 20 \mu\text{m}$  zu überprüfen (siehe Abbildung 2.2). Analytische Betrachtungen und numerische Berechnungsmethoden (auch für asymmetrische Reflexionen) der *geometrischen* Aberrationen findet man bei [Dir97]. Chromatische Aberrationen sind in Abschnitt 1.4.1 besprochen.

**Zeitliche Verschmierung** Ein Röntgenpuls, der an einem gebogenen Kristall reflektiert wird, verändert sich in seiner zeitlichen Struktur. Dafür gibt es zwei Gründe. Die Laufzeit von der Quelle zum Fokus ist abhängig vom Reflexionsort, bei symmetrischen Reflexionen ist dies allein auf die Abweichungen einer torischen Form vom Ellipsoid zurückzuführen und beträgt z. B. für Krümmungsradien von  $R_h \approx 164 \text{ mm}$ ,  $R_v \approx 136 \text{ mm}$  nach Strahlverfolgungsrechnungen von [MUF99] deutlich unter 100 fs. Bei asymmetrischen Reflexen können auch Laufzeitunterschiede von einigen Pikosekunden auftreten, wie in Abschnitt 1.4.2 abgeschätzt (Gleichung 1.19).

Für alle Reflexe entsteht während der Röntgenbeugung eine weitere zeitliche Verschmierung. In Kapitel 4 wird beschrieben, wie sich Netzebenenabstand und Braggwinkel über das Kristallvolumen verändern. Damit wird Strahlung unterschiedlicher Wellenlänge bei gleichem Einfallswinkel nach unterschiedlichem Weg im Kristall reflektiert und hat damit unterschiedliche Weglängen und -zeiten im Kristall zurückgelegt. Dieser Effekt der Eindringtiefe wird in [MUF99, CF95] behandelt. Die Eindringtiefe ist maximal im Grenzfall des Mosaikkristalls, dort ist die Absorptionslänge eine Maß für die Eindringtiefe. Typische Werte sind:

Material	Absorptionslänge für Fe $K_\alpha/\mu\text{m}$	Absorptionslänge für Cu $K_\alpha/\mu\text{m}$
Si	36,5	70,8
Quarz	67,9	132,7
Ge	15,1	28,3
GaAs	15,0	28,1



**Abbildung 2.1:** Formfaktoren der in den Silizium, Germanium, Galliumarsenid und Quarz vorkommenden Atomsorten. Markiert sind die Bereiche, in denen (links) Fe- $K_{\alpha}$ - bzw. (rechts) Cu- $K_{\alpha}$ -Strahlung einen Braggwinkel von  $40^{\circ}$  bis  $89^{\circ}$  hat [Pri04].

## 2.2 Reflexauswahl

Der maximale doppelte Netzebenenabstand  $2d$  des zu verwendenden Kristalls muss größer als die Wellenlänge sein (Bragggleichung  $n\lambda = 2d \sin \theta_B$ ), sollte aber nicht deutlich größer sein. Bei zu großen Werten von  $2d$  ist es nötig, Reflexe hoher Ordnung  $n$  zu verwenden, um nicht zu kleine Braggwinkel und damit ungünstige Radienverhältnisse verwenden zu müssen. Reflexionen hoher Ordnung haben allerdings meist niedrige integrale Reflexionsvermögen. Diese Bedingungen erfüllen insbesondere Quarz ( $\text{SiO}_2$ ), Silizium, Germanium und Galliumarsenid (GaAs), für die in der Arbeitsgruppe langjährige Präparationserfahrung vorhanden ist.

Galliumarsenid kristallisiert in der Zinkblende-Struktur, wobei Gallium und Arsen im Periodensystem in der 13. bzw. 15. Hauptgruppe der 4. Periode stehen. Die Kristallstruktur ist also der Diamantstruktur des Germanium sehr ähnlich. Hinzu kommt, dass sich ihre Gitterkonstanten nur geringfügig (0,5653 nm für Galliumarsenid und 0,5657 nm für Ge) unterscheiden. Mit den dem Germanium sehr ähnlichen Formfaktoren von Gallium und Arsen (siehe Abbildung 2.1) braucht man Germanium bei der Reflexauswahl also nicht gesondert von GaAs zu behandeln.

### 2.2.1 Symmetrische Reflexe

Zuerst sollen jeweils die intensivsten symmetrischen Reflexe aufgefunden werden. Aufgrund ihrer guten optischen Justierbarkeit und Unempfindlichkeit gegen eine azimutale Verdrehung<sup>2</sup> von Kristallkoordinatensystem zur Form, sind sie experimentell zu bevorzugen.

Mit Hilfe des Programmes Reflex, das zu dem in der Arbeitsgruppe entwickelten System DIXI zur Berechnung der Reflexionskurven gebogener Kristalle gehört [HOF98], wurden für Cu- und Fe- $K_{\alpha}$ -Strahlung alle Reflexe an Silizium, Quarz und GaAs bestimmt. Ergebnis des Program-

<sup>2</sup>Aufgrund elastischer Anisotropie gibt es allerdings eine mehr oder weniger starke Abhängigkeit des Reflexionsvermögens von dieser Verdrehung, siehe Abschnitt 4.2.

Fe $K_\alpha$	$\theta_B$	$\nu$	$R_v/\text{mm}$	$l_a/\text{mm}$	$R_{\text{int}}/\mu\text{rad}$	$f$	$f R_{\text{int}}/\mu\text{rad}$
GaAs (004)	43,2°	0,31	211	308	32,3	1,55	50,2
Quarz (30.1)	44,9°	0,05	224	318	23,5	1,42	33,4
GaAs (224)	57,0°	0,22/0,23	317	377	38,8/38,8	0,77	30,0/30,0
Quarz (02.3)	44,8°	0,07/0,16	223	317	18,5/14,5	1,43	26,5/20,8
GaAs (133)	48,3°	0,20/0,22	251	336	21,0/20,9	1,19	25,1/25,0
GaAs (044)	75,6°	0,22	422	436	88,6	0,26	23,5
Si (004)	45,5°	0,28	229	321	14,2	1,38	19,6
GaAs (115)	62,8°	0,29	356	400	32,9	0,58	19,0
GaAs (333)	62,8°	0,19	356	400	30,1	0,58	17,4
Si (224)	60,8°	0,21	343	393	24,1	0,64	15,4
Si (115)	67,8°	0,26	386	417	31,3	0,44	13,8
Si (333)	67,8°	0,19	386	417	25,6	0,44	11,3
Si (133)	51,0°	0,19/0,21	272	350	10,3/10,1	1,04	10,7/10,5
Quarz (10.5)	67,5°	0,10/0,11	384	416	11,0/12,1	0,45	4,9/5,4

**Tabelle 2.1:** Symmetrische Reflexe an Silizium, Galliumarsenid und Quarz für Fe- $K_\alpha$ -Strahlung. Für einige Reflexe sind die Poisson-Zahlen  $\nu$  und damit die integralen Reflexionsvermögen abhängig von der azimutalen Orientierung des Kristalls, angegeben sind jeweils Minimal- und Maximalwert. ( $R_v$ : Vertikalradius bei  $R_h = 450 \text{ mm}$ ,  $l_a$ : Quell- und Fokusabstand,  $f$  geometrischer Gewichtungsfaktor nach Gleichung 1.12)

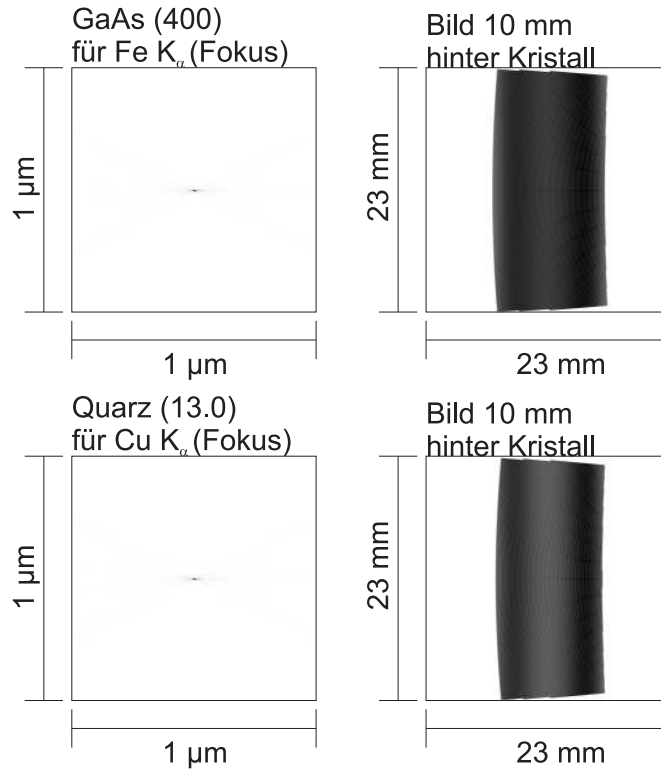
mes sind Tabellen von Reflexen mit ihren Braggwinkeln und integralen Reflexionsvermögen  $R_{\text{int}}$  nach der dynamischen und der kinematischen Theorie der Röntgenbeugung. Das Reflexionsvermögen eines gebogenen Kristalls liegt dazwischen und ist nur nach einer umfangreichen Rechnung (siehe [Gro97]) zu bestimmen.

Dafür wurden sämtliche Reflexe, deren kinematisches Reflexionsvermögen niedriger ist als das dynamische des stärksten Galliumarsenidreflexes, ausgeschlossen. Weiterhin ausgeschlossen wurden jene Reflexe mit einem Braggwinkel unter 40°, denn bei einer horizontalen Krümmung von 500 mm müsste der vertikale Krümmungsradius  $R_v = R_h \sin^2 \theta_B$  unter 200 mm sinken. Derart starke Krümmungen sind im verwendeten Verfahren und für die gewünschten Kristallgrößen nicht erreichbar. Der vorgegebene Mindestabstand von Kristall zur Probe von etwa 200 mm ist dann problemlos einzuhalten  $500 \text{ mm} \cdot \sin 40^\circ \approx 320 \text{ mm} > 200 \text{ mm}$ . Auch Braggwinkel über 70° müssen aus geometrischen Gründen an der Vakuumkammer ausgeschlossen werden.

In den Tabellen 2.1 und 2.2 sind die nicht ausgeschlossenen symmetrischen Reflexionen für Fe und Cu- $K_\alpha$ -Strahlung nach  $f \cdot R_{\text{int}}$  geordnet aufgelistet. Der Faktor  $f$  ist der geometrische Gewichtungsfaktor aus Gleichung 1.12. Für die Bestimmung des integralen Reflexionsvermögens wurde jeweils DIXI benutzt (unpolarisierte Strahlung, Kristalldicke groß gegen Eindringtiefe, jeweils angegebene torische Biegung). Die dafür nötigen Poisson-Zahlen wurden nach dem in Abschnitt 4.2.3 beschriebenen Verfahren mit Hilfe des Programms `nurot.m` bestimmt. Die in Ab-

Cu K $_{\alpha}$	$\theta_B$	$\nu$	$R_v/\text{mm}$	$l_a/\text{mm}$	$R_{\text{int}}/\mu\text{rad}$	$f$	$fR_{\text{int}}/\mu\text{rad}$
Quarz (13.0)	40,8°	0,09/0,17	192	294	22,6/19,8	1,78	40,2/35,2
GaAs (224)	41,9°	0,22/0,24	200	300	22,1/20,8	1,67	36,9/34,8
Si (224)	44,0°	0,20/0,22	217	313	16,7/14,1	1,49	24,9/21,0
GaAs (333)	45,1°	0,19	226	319	13,5	1,41	19,0
Si (026)	63,8°	0,26	362	404	33,16	0,55	18,2
GaAs (044)	50,4°	0,20/0,23	267	347	16,6/16,9	1,07	17,8/18,1
Quarz (05.2)	71,6°	0,19	405	427	50,4	0,35	17,6
GaAs (026)	59,5°	0,23/0,25	334	388	23,3/24,3	0,68	15,9/16,6
GaAs (115)	45,1°	0,29/0,30	226	319	11,0/11,0	1,41	15,5/15,5
Si (444)	79,3°	0,18	434	442	78,7	0,19	15,1
GaAs (444)	70,7°	0,19	401	425	40,2	0,37	14,9
GaAs (117)	76,7°	0,3	426	438	54,6	0,24	13,3
Si (333)	47,5°	0,18	244	332	10,6	1,24	13,2
GaAs (135)	53,7°	0,23/0,25	292	363	12,3/12,8	0,91	11,2/11,6
GaAs (155)	76,7°	0,21	426	438	46,4	0,24	11,3
GaAs (335)	63,3°	0,21	359	402	19,4	0,56	10,9
Si (335)	68,4°	0,2	389	419	23,4	0,42	9,9
Si (044)	53,4°	0,19/0,21	290	361	9,2/10,6	0,93	8,5/9,8
Si (115)	47,5°	0,26/0,27	244	332	6,5/7,4	1,24	8,1/9,2
Quarz (42.2)	88,1°	0,07	450	450	136,5	0,03	4,5
Quarz (20.6)	68,2°	0,08	388	418	10	0,43	4,3
Quarz (42.2)	76,8°	0,05	426	438	11,2	0,24	2,7
Quarz (24.2)	88,1°	0,16	450	450	47,3	0,03	1,5

**Tabelle 2.2:** Symmetrische Reflexe an Silizium, Galliumarsenid und Quarz für Cu-K $_{\alpha}$ -Strahlung.



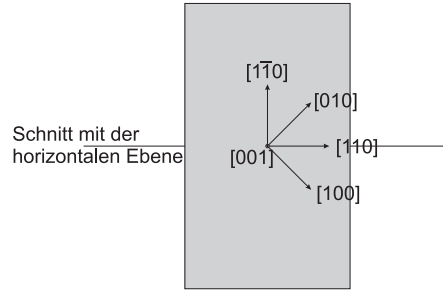
**Abbildung 2.2:** Ergebnisse der Strahlverfolgung mit dem Programm T-Ray [Dir97, Vol98]. Links: Fokusbilder, Rechts: Ausleuchtung der je  $16\text{ mm} \times 23\text{ mm}$  angenommenen Kristalle. Für ideale Präparation und Justage des gebogenen Kristalls ist das Fokusbild einer Punktquelle deutlich kleiner als  $1\text{ }\mu\text{m}$ . Die geometrischen Abbildungsfehler sind also gegenüber der Quellgröße des Plasmas vernachlässigbar klein.

bildung 2.2 zusammengefassten Strahlverfolgung für die Favoriten GaAs (004) und Quarz (13.0) zeigen, dass bei idealem Radienverhältnissen und optimaler Justage die optischen Abbildungsfehler deutlich kleiner als  $1\text{ }\mu\text{m}$  und damit für diese Anwendung tatsächlich vernachlässigbar sind.

Für den in der Aufstellung für Fe  $K_\alpha$ -Strahlung als intensivsten erkannten Reflex wurde bereits der Kristall präpariert, seine Abbildungseigenschaften werden in Abschnitt 3.2 untersucht.

### 2.2.2 Asymmetrische Reflexe

Für asymmetrische Reflexionen ist die Orientierung von Kristalloberfläche und Einfallsebene zueinander wichtig. Im koplanar asymmetrischen Fall liegen Oberflächennormalenvektor und der Zentralstrahl in der horizontalen Ebene. Praktisch durchführbar ist das besonders einfach an Galliumarsenid mit zur Oberfläche parallelen (001)-Ebenen, weil mit den Spaltflächen (110), ( $\bar{1}\bar{1}0$ ), ( $1\bar{1}0$ ), ( $\bar{1}\bar{1}0$ ) ein rechteckiger dünner Kristall entsteht. Die entstehenden Bruchkanten lassen sich gut senkrecht zu den Torusradien ausrichten. Wie man aus Abbildung 2.3 entnimmt, gilt



**Abbildung 2.3:** Lage der Bruchkanten bei Präparation eines gebogenen GaAs-Kristalls.

	$\theta_B$	$\phi$	$\frac{R_v}{\text{mm}}$	$\frac{l_a}{\text{mm}}$	$\frac{l_b}{\text{mm}}$	$\frac{R_{\text{int}}}{\text{mm}}$	$f$	$\frac{fR_{\text{int}}}{\text{mm}}$	$\frac{\Delta x}{\Delta y}$
(224), Fe	57,0°	35,3°	167	167	450	61,7	1,75	108,0	0,49
(115), Fe	62,8°	15,8°	323	329	441	37,5	0,70	26,3	3,83
(335), Cu	63,3°	40,3°	171	176	437	23,4	1,29	30,1	0,62
(115), Cu	45,1°	15,8°	192	220	393	14,6	2,04	29,8	1,08

**Tabelle 2.3:** Mögliche asymmetrische Galliumarsenid-Reflexe.  $fR_{\text{int}}$  ist ein Maß für die Effizienz pro effektiver Kristallfläche,  $\Delta x/\Delta y$  (siehe Abschnitt 1.3.3) beschreibt deren Form. Die Oberfläche ist (100)-orientiert, der Einfall ist streifend.

bei einer asymmetrischen Reflexion, dass der Netzebenennormalenvektor  $[hkl]$  senkrecht auf die  $[\bar{1}10]$ -Richtung stehen muss. Weiterhin muss der Asymmetriewinkel, den die Oberflächennormale mit der Einfallsebene einschließt, kleiner als der Braggwinkel der Reflexion sein, damit der Ausfallswinkel positiv bleibt.

Diese Bedingungen erfüllen für Fe- $K_\alpha$ -Strahlung folgende Reflexionen: (333), (113), (224), (115); für Cu  $K_\alpha$  sind es (113), (224), (444), (335), (115). Einen vertikalen Krümmungsradius  $R_v = R_h \sin \theta_H \sin \theta_0$  (siehe Abschnitt 1.4.2) größer als der noch praktikable Radius von  $R_v = 150 \text{ mm}$  für  $R_h = 450 \text{ mm}$  haben nur (224), (115) bzw. (335), (115).

Die Oberflächen sind stets (001)-Netzebenen, die, wie eine Rechnung nach Abschnitt 4.2.3 zeigt, unabhängig von den Krümmungsradien eine  $z$ -Abhängigkeit des Netzebenenabstandes aufweisen, der durch  $\nu = 0,31$  charakterisiert ist.

In Tabelle 2.3 sind die möglichen asymmetrischen Reflexionen angegeben. Alle vier effektiven Kristallflächen sind von Hyperbeln begrenzt. Die in Abschnitt 1.3.3 beschriebene Kenngröße  $\Delta x/\Delta y$  ist jeweils ungünstig für den (115)-Reflex bei beiden Strahlungen.

Zu bedenken ist jeweils auch die Quellvergrößerung im Abbildungsmaßstab  $l_b/l_a$ . Für die Anwendung in CORA ist sie für die beiden intensivsten Fällen inakzeptabel groß (2,7 bzw. 2,5). Die verkleinernde, entgegengesetzte Einstrahlrichtung  $\phi < 0$  ist hingegen wenig intensiv. Man erhält also durch Verwendung von asymmetrischen Reflexen für diese Anwendung keine Vorteile.

## 3 Test gebogener Kristalle

### 3.1 Versuche für Fokussierungen außerhalb des Rowlandkreises

In Abschnitt 1.4.2 wurde darauf hingewiesen, dass für asymmetrische Reflexionen über einen bestimmten, kontinuierlichen Wellenlängenbereich Punkt-zu-Punkt-Abbildungen möglich sind. Dies wurde durch Abbildungsexperimente einer Laser-Plasmaquelle sowie durch ein Experiment an einer Feinfokusröhre mit Kupfer  $K_\alpha$ -Strahlung nachgewiesen.

Durch Reflexion an einem einzigen Galliumarsenidkristall (laufende Nummer 165) mit den Radien  $R_h = 455\text{ mm}$  und  $R_v = 222\text{ mm}$  wurden die drei Fokussierungen erreicht. Die Ausdehnungen des Kristalls sind  $x_h = 23\text{ mm}$  und  $x_v = 16\text{ mm}$ , die Oberfläche ist parallel zu den (001)-Netzebenen, und die Kristallkanten entsprechen  $\{110\}$ -Spaltflächen. Die geometrischen Lagen von Quelle und Fokus zum Kristall für die drei Fokussierungen sind in Abbildung 3.1 dargestellt.

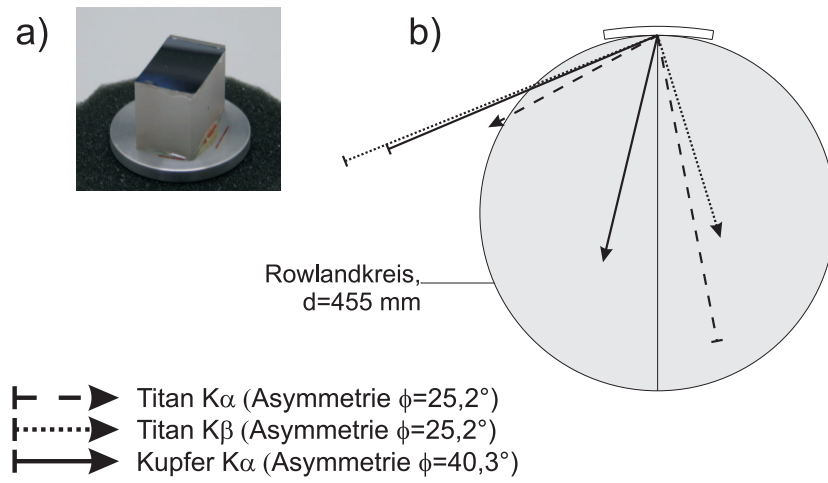
	$\lambda/\text{nm}$	Netzebenen	$\theta_B$	$\phi$	$\theta_0$	$\theta_H$	$l_a/\text{mm}$	$l_b/\text{mm}$
Ti $K_\alpha$	0,2749	(113)	$53,7^\circ$	$-25,2^\circ$	$78,9^\circ$	$28,5^\circ$	391	251
Ti $K_\beta$	0,2514	(113)	$47,5^\circ$	$25,2^\circ$	$22,3^\circ$	$72,7^\circ$	429	272
Cu $K_\alpha$	0,1541	(335)	$63,3^\circ$	$40,3^\circ$	$23,0^\circ$	$103,6^\circ$	370	291

Die vorhandene Laser-Plasmaquelle wird in [Käm04] beschrieben und charakterisiert. Der Ti:Sa-Laser erzeugt mit einer Impulsfrequenz von  $1\text{ kHz}$  und einer Leistung von  $3,5\text{ mJ}$  pro Impuls Bremsstrahlung und charakteristische Strahlung an einem Titan-Bandtarget. Bei einem Impuls werden in einen Raumwinkel von  $4\pi$  etwa  $3 \cdot 10^7$  Ti  $K_\alpha$ - und Ti  $K_\beta$ -Photonen erzeugt. Der Durchmesser der Röntgenquelle beträgt etwa  $50\text{ }\mu\text{m}$ . Cu  $K_\alpha$ -Strahlung wurde mit einer einfachen Feinfokusröhre erzeugt. In beiden Fällen wurde als Detektor eine Roper RI-MTE Röntgen-CCD mit einer Pixelgröße von  $20\text{ }\mu\text{m} \cdot 20\text{ }\mu\text{m}$  eingesetzt.

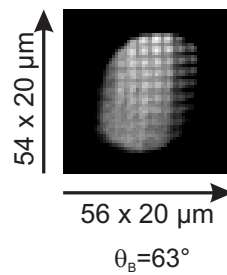
Die Punkt-zu-Punkt-Abbildung mit Cu- $K_\alpha$ -Strahlung wurde mit einem Abbildungstest eines Gitters wie in Abschnitt 3.2 nachgewiesen. Das  $100\text{ }\mu\text{m}$ -Gitter wird im Maßstab  $0,79$  auf den CCD-Chip abgebildet, die Stege sind also in der Abbildung  $100 \cdot 0,8/20 = 4$  Pixel voneinander entfernt (Abbildung 3.2).

Für die beiden Reflexe an charakteristischer Titan-Strahlung wurde jeweils an der Laser-Plasma-Quelle eine Fokussierung aufgenommen, und die horizontale und vertikale Fokussausdehnung vermessen (Abbildung 3.3 und 3.4). Die Abbildungen der  $> 50\text{ }\mu\text{m}$  ausgedehnten Quelle



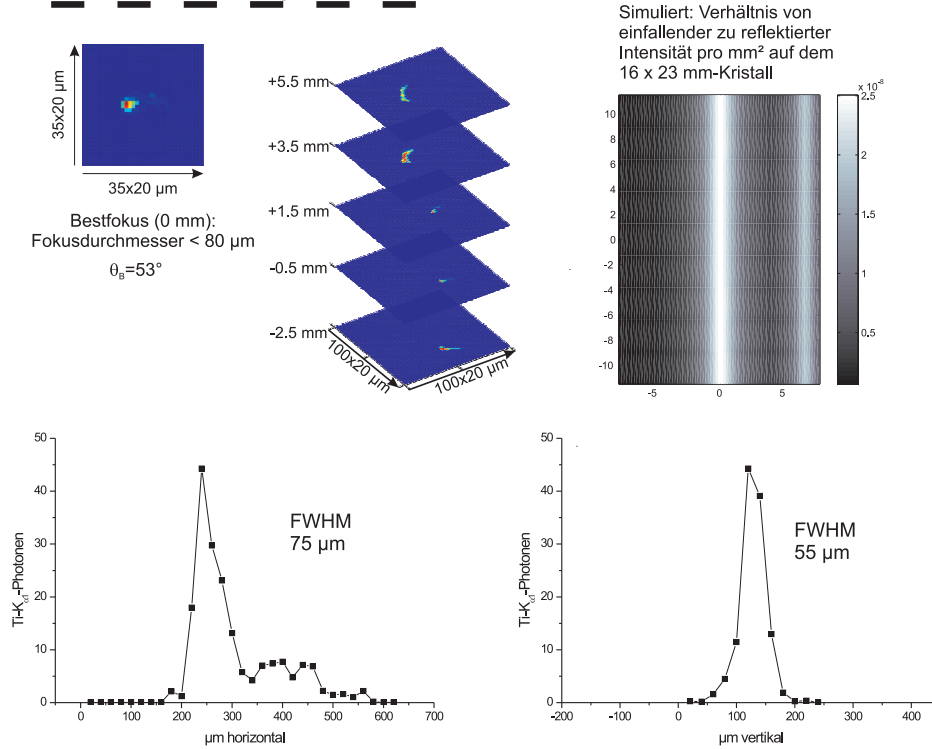


**Abbildung 3.1:** Kristall und Geometrie der Reflexionen. a) Für diese Fokussierungen verwendeter Kristall, der im Text charakterisiert wird. b) Die Pfeile zeigen die optischen Achsen der Fokussierungen mit den drei angegebenen Strahlungen in Bezug auf den Rowlandkreis dieses Kristalls. Die Pfeilspitze zeigt jeweils auf die Fokuspositionen, der Pfeilursprung bezeichnet die Quellposition.



**Abbildung 3.2:** Abbildungstest eines  $100 \mu\text{m}$ -Gitters, Cu  $K\alpha$ -Strahlung

## Titan $K\alpha$ , Fokusbild an Plasmaquelle



**Abbildung 3.3:** Fokussiererei und Profilschnitte im Bestfokus für Ti- $K\alpha$ -Strahlung. Belichtungszeit im Bestfokus 5 s.

sind *nicht erkennbar verbreitert*. Für eine Abbildung musste im Bestfokus 5 s, im Fall von  $K\beta$ -Strahlung 120 s belichtet werden.

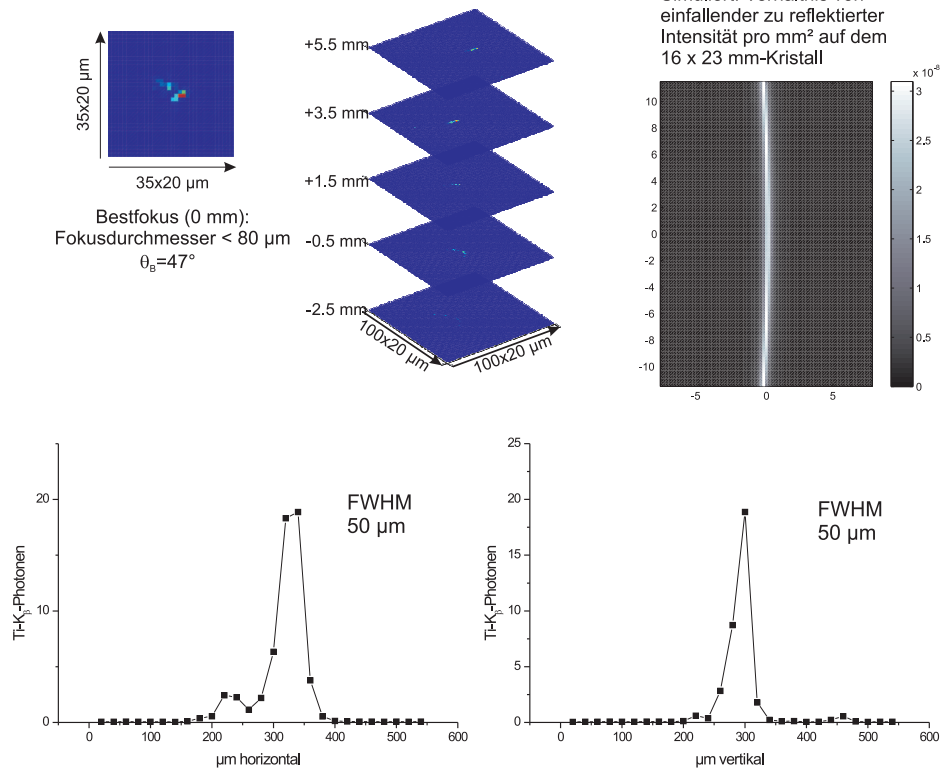
### 3.1.1 Intensität der Reflexion

Für die Fokussierung der Ti- $K\alpha$ -Strahlung bietet es sich an, die Intensität der Reflexion zu betrachten und so die Ausdrücke aus Abschnitt 1.2 und die Photonenzahlungsmessung aus [Käm04] zu überprüfen.

Im Fokus (siehe Abbildung 3.3) wurden nach einer Integrationszeit von 5 s, also 5000 Impulsen, 760  $K\alpha_1$ -Photonen registriert. Die am Target erzeugten Photonen  $N_0$  wurden gemindert durch

- das Austrittsfenster der evakuierten Quellenkammer, 50  $\mu\text{m}$  Kapton; Faktor  $f_K = 0,78$ ,
- das Eintrittsfenster der Röntgen-CCD (Roper RI-MTE), 200  $\mu\text{m}$  Beryllium; Faktor  $f_{Be} = 0,88$
- und die Quanteneffizienz der CCD für Ti  $K\alpha$  nach Herstellerangabe  $f_Q = 0,55$ .

## Titan $K\beta$ , Fokusbild an Plasmaquelle



**Abbildung 3.4:** Fokusserserie und Profilschnitte im Bestfokus für  $\text{Ti-K}\beta$ -Strahlung. Belichtungszeit im Bestfokus 120 s.

### 3 Test gebogener Kristalle

Auf einem Teil des Strahlwegs, auf der Strecke Quell- plus Fokulentfernung minus Strahlweg im Vakuum wurde die Strahlung nicht durch Luftabsorption geschwächt. Bei 100 hPa, 20 °C,  $T_{K_\alpha}$  ist die Luftabsorption

$$f_L = \exp(-(l_a + l_b - 150 \text{ mm})/155 \text{ mm}) = \exp(-(391 + 251 - 150)/155) = 4,2 \cdot 10^{-2}.$$

Das bedeutet, dass ohne Absorptionseffekte

$$N_{\text{refl}} = N'_{\text{refl}} f_K f_{Be} f_L f_Q \cdot 4,8 \cdot 10^4$$

Photonen den Fokus erreicht hätten. Nach den Überlegungen in Abschnitt 1.3 gilt für diese Fokussierung außerhalb des Rowlandkreises ( $f_a = -0,124$ )

$$\begin{aligned} N_{\text{refl}} &= (aN_0) \left( \frac{\Delta\lambda}{\lambda_0} \tan \theta_B \right)^{-1} \frac{\Delta\alpha \Delta\Phi}{\Omega_0} R_{\text{int}} \\ \Delta\alpha &= \left( \frac{\Delta\lambda}{\lambda_0} \tan \theta_B \right) / |f_a| \\ aN_0 &= N_{\text{refl}} \frac{l_a |f_a| \Omega_0}{\Delta y R_{\text{int}}}. \end{aligned}$$

Mit dem Programm DIXI bestimmt man das integrale Reflexionsvermögen des (113)-Reflexes ( $\nu = 0,31$ ,  $\phi = -25,2$ ) zu  $R_{\text{int}} = 36,1 \mu\text{rad}$ .

Nimmt man wie für Gleichung 1.8 ein Lorentz-Profil der Spektrallinie an, gilt als Abschätzung für die erzeugten Photonen pro Impuls

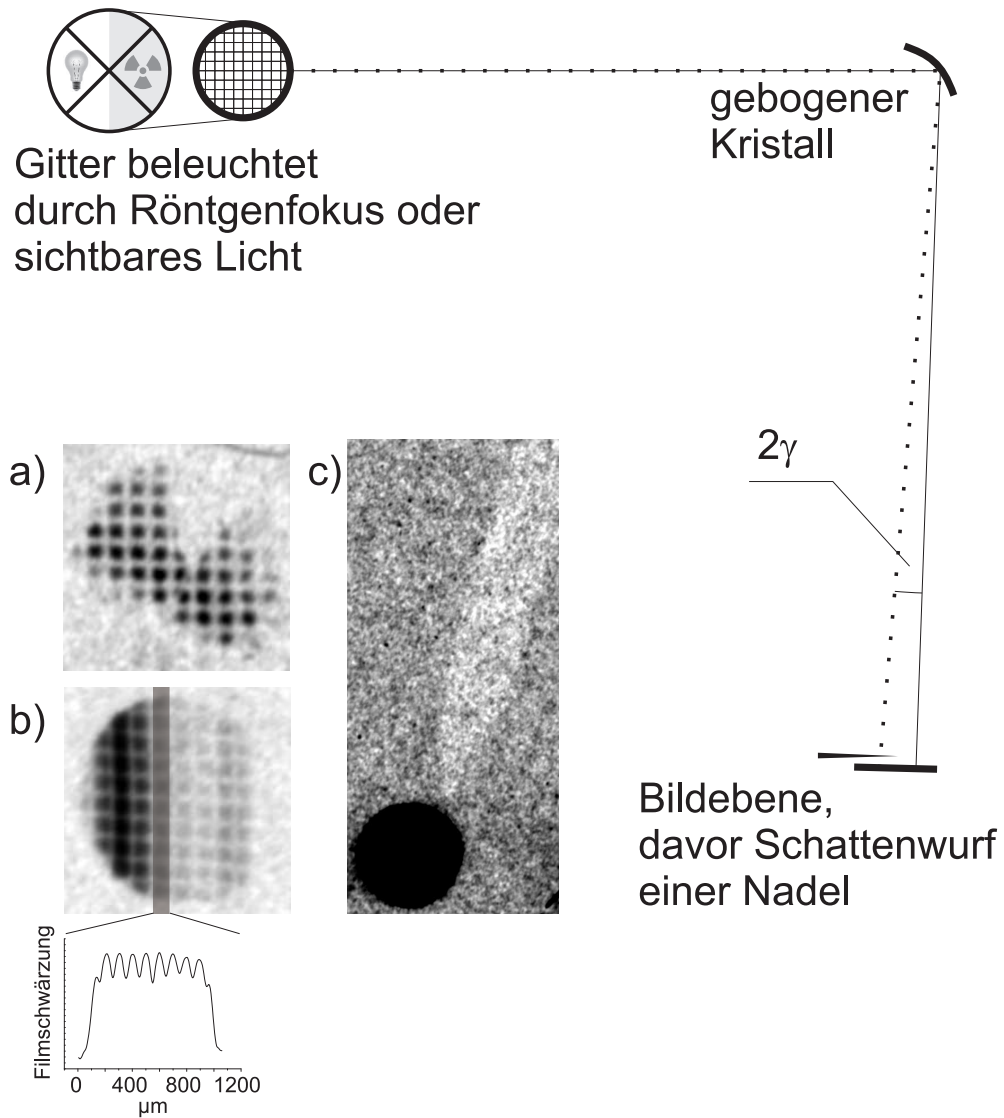
$$1,1 \cdot 10^7 < N_0 < 2,2 \cdot 10^7.$$

Dies ist in Übereinstimmung mit der Angabe aus [Käm04], dass die Quelle pro Impuls  $3 \cdot 10^7$   $K_{\alpha 1}$ -,  $K_{\alpha 2}$ - und  $K_\beta$ -Photonen erzeugt, von denen hier nur  $K_{\alpha 1}$  genutzt wurden.

## 3.2 Test des Kristalls für Fe $K_{\alpha 1}$ für das CORA-System

Am ersten Kristall, der für das CORA-Projekt gebogen wurde, konnte noch der in [Vol98] ausführlich beschriebene Abbildungstest durchgeführt werden. Es handelt sich um den in Tabelle 2.1 erstgenannten Galliumarsenid (004)-Reflex.

Das Prinzip und die Ergebnisse sind in Abbildung 3.5 zusammengefasst. Bei sonst unverändertem Aufbau wird ein Gitter (Abstand der Stege  $100 \mu\text{m}$ ) durch sichtbares Licht einer Kondensorlampe oder mit einer Feinfokusröhre beleuchtet. Durch einen kleinen Winkel zwischen Netzebenenormalen und Oberflächennormalen, dem Fehlschnitt  $\gamma$ , erscheint das optische Bild des Gitters gegenüber dem röntgenoptischen Bild des Gitters etwas versetzt. Um diese Versetzung zu erfassen, wird die Position des Bildes durch den Schattenwurf einer fest vor der Filmkassette gelagerten Nadel aufgezeichnet. Für diesen Kristall ist der Fehlschnitt so groß,



**Abbildung 3.5:** Abbildungstest für den Fe  $K_{\alpha}$ -Kristall. a) Abbildung mit optischem Licht, Kristall ist voll ausgeleuchtet, bei geringerer Ausleuchtung gehen geometrische Abbildungsfehler deutlich zurück. b) Abbildung mit Eisen  $K_{\alpha}$ -Strahlung. Die Quelle ist etwa 6 cm hinter dem Rowlandkreis. Jene Strahlen, die die linke Hälfte des Gitters (auf dem Rowlandkreis) beleuchten, treffen verstärkt unter gegenüber dem Zentralstrahl verminderten Braggwinkeln auf dem Kristall auf. Man erkennt die stark quellverbreiterten  $K_{\alpha 1}$ - und  $K_{\alpha 2}$ -Linien im Gitterbild. c) Schattenwurf der Nadel bei Aufnahme mit Bremsstrahlung von einer Wolframanode.

### 3 Test gebogener Kristalle

dass im röntgenoptischen Bild (Eisenanode) der Schatten der Nadel nicht sichtbar war. Um ihre Position dennoch zu bestimmen, wurde ein weiteres, stark überbelichtetes, röntgenoptisches Bild des Gitters mit einer Feinfokusröhre mit Wolframanode angefertigt, in dem die Nadel als Schatten in der Schwärzung durch Streustrahlung neben dem Bild des Gitters sichtbar wird. Der Fehlschnitt  $\gamma$  in horizontaler Ebene beträgt  $2'0'' \pm 5''$ , in vertikaler Ebene ist er  $3'20'' \pm 10''$ . Dieser Fehlschnitt verursacht einen systematischen Positions- und Braggwinkelfehler bei der optischen Justage in Rowlandkreisposition von  $(355 \pm 15) \mu\text{m}$  horizontal und  $(590 \pm 15) \mu\text{m}$  vertikal.

Die Angabe des Kristallherstellers, dass der Fehlschnitt  $\gamma < 0,1^\circ = 6'$  sei, ist damit bestätigt.

Wie der Profilschnitt zeigt, wird in der röntgenoptischen Abbildung des Gitters die geforderte räumliche Auflösung besser als  $50 \mu\text{m}$  erreicht.

## 4 Elastischer Zustand gebogener Kristalle

Die Reflexionskurve eines gebogenen perfekten Kristalls unterscheidet sich hauptsächlich durch zwei Effekt von der des ungebogenen Kristalls [CFSZ92]. Der *geometrische Effekt* beschreibt dabei, dass ein einfallender Strahl auf seinem Weg durch den Kristall in verschiedenen Tiefen eine andere Neigung gegen die Netzebenen hat (siehe Abbildung 4.1). Man kann diesen ausschließlich durch die horizontale Krümmung hervorgerufenen Effekt durch eine  $z$ -Abhängigkeit der Braggwinkelabweichung  $\sigma$  beschreiben ( $z = 0$ : Kristallmitte;  $z$  positiv: Oberfläche).

$$\begin{aligned}\sigma(\alpha, \Phi, z) &= \sigma(\alpha, \Phi) + \sigma_z(z) \\ &= \sigma(\alpha, \Phi) - \frac{z}{R_h \tan \theta_0}\end{aligned}\tag{4.1}$$

Dieser Effekt wird zwar von dem Programm DIXI zur Reflexionskurvenberechnung behandelt, nicht aber von der Strahlverfolgung T-Ray, die Reflexion an der Kristalloberfläche annimmt.

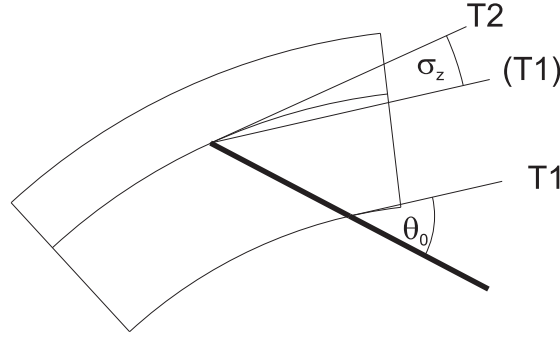
Durch die elastische Biegung des Kristalls verändern sich die Netzebenenabstände im Kristall, über die Bragggleichung verursacht dies eine Veränderung des Braggwinkels. Diesen Effekt nennt man den *elastischen Effekt*. Um die Reflexionseigenschaften eines gebogenen Kristalls zu bestimmen, ist es also notwendig, die Veränderung der Atompositionen durch Deformationsfelder zu bestimmen. Erst dann kann die gesicherte Theorie der Beugung (z. B. [Gro97]) in deformierten Kristallen angewendet werden. In [UFGH93] wird gezeigt, dass sich das integrale Reflexionsvermögen für kleiner werdende Krümmungsradien von dem des perfekten, ungebogenen Kristalls ( $R \rightarrow \infty$ ), wie es aus der dynamischen Theorie folgt, vergrößert und den Grenzwert des Reflexionsvermögens des idealen Mosaikkristalls anstrebt. Diese Reflexionsvermögen sind für den hier untersuchten Spektralbereich um einen Faktor 3 bis 5 verschieden.

Die Kenntnis der Deformationsfelder könnte für erzwungen gebogene Kristalle auch dafür interessant sein um festzustellen, ob die im Kristall gespeicherte elastische Energie  $E_{\text{pot}}$  kleiner ist als die durch das Ansprengen gewonnene Oberflächenenergie  $|E_o| = |A\sigma_o|$ .

### 4.1 Bekannte Eigenschaften

Für asymmetrische Reflexe ist der Einfluss des Deformationstensors auf den Netzebenenabstand  $d$  gegeben durch ( $\phi$ : Asymmetriewinkel)

$$2d = 2d_0(1 + \varepsilon_z \cos \phi + \varepsilon_x |\sin \phi|).$$



**Abbildung 4.1:** Geometrischer Effekt auf die Reflexionskurve eines in der horizontalen Ebene gebogenen Kristalls (symmetrischer Fall gezeichnet). Beim Eindringen des (fett gedruckten) Strahls in den Kristall schließen die Netzebenentangente T1 und die Tangente T2 einen Winkel  $\sigma_z$  ein. Durch um einen Asymmetriewinkel  $\phi$  verdrehte T1, T2 ändert sich  $\sigma_z$  nicht.

Theoretische Untersuchungen zum elastischen Zustand erzwungen und frei gebogener Kristalle<sup>1</sup> sind in [CCF94, CHWF96] zusammengefasst. Dort wird der Spezialfall behandelt, dass im betrachteten Kristallschnitt die Komponenten  $s_{16}$  und  $s_{26}$  der elastischen Nachgiebigkeit verschwinden. Die dort erzielten Ergebnisse für den Fall der erzwungenen Biegung können mit einer anderen Behandlung reproduziert und sogar verallgemeinert werden.

## 4.2 Allgemeiner Fall voll anisotroper Kristalle

### 4.2.1 Elastizitätstheoretische Grundlagen

In der Elastizitätstheorie (hier nach [Fal07]) macht man üblicherweise zwei Vereinfachungen, um die Bestimmungsgleichungen der Deformation zu linearisieren. Die erste, die *Linearisierung des Materialgesetzes*, besagt, dass im Materialgesetz keine höheren Terme als der lineare auftreten

$$\sigma_i = s_{ij}\varepsilon_j \quad \varepsilon_j = c_{ji}\sigma_i. \quad (4.2)$$

Dies gilt für Kristalle in sehr guter Näherung selbst bei Spannungen kurz vor dem Bruch. Die zweite Näherung (die sogenannte *geometrische Linearisierung*) ist die, dass der Verschiebungsvektor  $\vec{u} = \vec{x}' - \vec{x}$  klein ist, die Produkte seiner Komponenten also vernachlässigbar.

$$\begin{aligned} \varepsilon_{ij} &= \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_l}{\partial x_i} \frac{\partial u_l}{\partial x_j} \right) \\ &\approx \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \end{aligned} \quad (4.3)$$

<sup>1</sup>Bei *erzwungener Biegung* erhält der Kristall seine Gestalt durch die von einer Form über seine gesamte Rückseite ausgeübten Zwangskräfte, bei *freier Biegung* erhält er seine Form durch an den Stirnflächen angreifende Biegemomente.



Für die Tensoren zweiter Stufe der Deformation  $\varepsilon_{ij}$  und der Spannung  $\sigma_{ij}$  sowie der Tensoren vierter Stufe der elastischen Steifigkeit  $c_{ijkl}$  und Nachgiebigkeit  $s_{ijkl}$  wird zumeist die Voigt'sche Notation angewendet [Pri04];  $\varepsilon_i$  und  $\gamma_{ij}$  (Deformation: Dehnung und Verzerrung),  $\sigma_i$  und  $\tau_{ij}$  (Schub- und Scherspannungen),  $c_{ij}$ ,  $s_{ij}$ .

Das ist für dreidimensionale Probleme bei spröden Körpern ebenfalls stets der Fall, nicht aber in der Theorie der dünnen Platten und Balken [Lek68, Tim87]. Die Näherung versagt dann, wenn der Betrag von  $\vec{u}$  in die Größenordnung der Plattendicke kommt [Lek68]. Bei einem gebogenen Kristall mit einem Krümmungsradius von 500 mm und einer Dicke von  $80 \mu\text{m}$  versagt sie also schon bei einer Kantenlänge von nur 10 mm ( $|\vec{u}| \approx 25 \mu\text{m}$ ). Erzwungen gebogenen Kristalle können teilweise deutlich größer sein. Zunächst soll diese Näherung dennoch beibehalten werden; im Abschnitt 4.3 werden Überlegungen angestellt, wie der elastische Zustand eines Kristalls aussieht, in dem diese Näherung nicht gilt.

Für den Fall, dass die geometrischer Linearisierung gerechtfertigt ist, gelten die Kompatibilitätsbedingungen [Fal07] ( $\epsilon$ : Levi-Civita-Symbol,  $\varepsilon$ : Deformationstensor)

$$\eta_{ij} = \epsilon_{ikl}\epsilon_{jmn}\partial_k\partial_n\varepsilon_{lm}, \quad (4.4)$$

wobei die *Inkompatibilität*  $\eta$ , ein symmetrischer Tensor zweiter Stufe, für einen defektfreien Kristall verschwindet. Von diesen 6 Gleichungen  $\eta_{ij} = \eta_{ji} = 0$  sind nur 3 unabhängig voneinander. Mit den drei Kraftgleichungen und den Randbedingungen sind alle 6 Komponenten der Deformation bestimmt. Mit dem linearen Materialgesetz 4.2 folgen daraus die Spannungen.

Kräftegleichgewicht stellt sich dann ein, wenn

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{\sigma} + \vec{F} = \vec{0}$$

oder ausgeschrieben

$$\begin{aligned} \partial_x\sigma_x + \partial_y\tau_{xy} + \partial_z\tau_{xz} &= -F_x \\ \partial_x\tau_{xy} + \partial_y\sigma_y + \partial_z\tau_{yz} &= -F_y \\ \partial_x\tau_{xz} + \partial_y\tau_{yz} + \partial_z\sigma_z &= -F_z \end{aligned} \quad (4.5)$$

gilt. Die Volumenkräfte entstehen hier nur durch die Gravitation und sind vernachlässigbar klein  $\vec{F} \approx \vec{0}$ .

Die im Kristall gespeicherte Energie ist gegeben durch das Volumenintegral

$$E_{\text{pot}} = \frac{1}{2} \int_V \sigma_{ij}\varepsilon_{ij} dV.$$

Die Randbedingungen des durch Kraftgleichungen und Kompatibilitätsbedingungen aufgestellten Differentialgleichungssystem ist das Gleichgewicht mit äußeren Oberflächenkräften.

### 4.2.2 Rechnung

Bei einem erzwungen gebogen Kristall ist die Kantenlänge um mehrere Größenordnungen größer als die Dicke. Falls der Deformationszustand vom Ort in der Fläche parallel zur Form  $(x, y)$  abhängt, so ist diese Abhängigkeit deutlich schwächer als die in  $z$ -Richtung. Damit kann man  $\varepsilon_i = f_i(z)$  setzen. Den Kompatibilitätsbedingungen entnimmt man, dass dann die zweiten  $z$ -Ableitungen aller Komponenten der Deformation verschwinden müssen; alle Komponenten des Deformationstensors sind lineare Funktionen von  $z$ .

Aus der Annahme, dass Flächen, die parallel zur Oberfläche liegen, auch nach dem Biegen weiterhin parallel zur Oberfläche sind („hypothesis of straight normals“, [Lek68, Kapitel 9]) folgt für die Komponenten des Verschiebungsvektors  $\vec{u}$  rein geometrisch

$$u_x = -z \frac{\partial u_z}{\partial x} \quad u_y = -z \frac{\partial u_z}{\partial y}.$$

Weiter folgt nach der Definition der Komponenten des Deformationstensors (Gleichung 4.3)

$$\varepsilon_x \equiv \frac{\partial u_x}{\partial x} = -z \frac{\partial^2 u_z}{\partial x^2} \quad \varepsilon_y \equiv \frac{\partial u_y}{\partial y} = -z \frac{\partial^2 u_z}{\partial y^2} \quad \gamma_{xy} \equiv \frac{\partial u_y}{\partial x} + \frac{\partial u_x}{\partial y} = -2z \frac{\partial^2 u_z}{\partial x \partial y},$$

wobei  $u_x$  und  $u_y$  sehr viel kleiner als  $u_z$  sind (geometrische Linearisierung). Damit beschreibt  $u_z(x, y)$  näherungsweise die Oberfläche der Kristallform. Die zweite Ableitung einer bogenlängenparametrisierten Oberfläche entlang einer Koordinatenlinie ist an jeder Stelle der reziproke Krümmungsradius in der durch Normale und Koordinatenlinie aufgespannten Ebene [FK03]. Die erste Ableitung entlang einer solchen Koordinatenlinie verschwindet hingegen stets, da die Koordinatenlinie tangential zur Fläche verläuft. In dem Bereich, in dem die geometrische Linearisierung gilt, kann man die Koordinaten  $x$  und  $y$  mit einer Bogenlängenparametrisierung der Kristalloberfläche gleichsetzen. Damit gilt

$$\varepsilon_x = -\frac{z}{R_h} \quad \varepsilon_y = -\frac{z}{R_v} \quad \gamma_{xy} = 0.$$

Die drei Kraftgleichungen 4.5 geben schließlich ein Gleichungssystem für die drei noch offenen linearen  $z$ -Abhängigkeiten der übrigen drei Komponenten des Deformationstensors  $\varepsilon_z$ ,  $\gamma_{xz}$ ,  $\gamma_{yz}$ , die Rechnung ist zwar unkompliziert, aber etwas aufwändig. Die Verzerrungen  $\gamma_{xz}$  und  $\gamma_{yz}$  haben dabei keine Auswirkungen auf die Form der Reflexionskurve,  $\varepsilon_z$  ist

$$\varepsilon_z = z \frac{A/R_h + B/R_v}{C}, \quad (4.6)$$

wobei

$$A = s_{26}^2 s_{13} + s_{22} s_{16} s_{36} + s_{12} s_{23} s_{66} - s_{23} s_{16} s_{26} - s_{12} s_{26} s_{36} - s_{22} s_{13} s_{66}$$

$$B = s_{16}^2 s_{23} + s_{11} s_{26} s_{36} + s_{12} s_{13} s_{66} - s_{13} s_{16} s_{26} - s_{12} s_{16} s_{36} - s_{11} s_{23} s_{66}$$

$$C = s_{26}^2 s_{11} + s_{16}^2 s_{22} + s_{12}^2 s_{66} - s_{11} s_{22} s_{66} - 2 s_{12} s_{16} s_{26}.$$

Für den Fall, dass im gewählten Schnitt die Komponenten  $s_{16} = s_{26} = 0$  sind, wie in der Herleitung von [CHWF96] angenommen, vereinfachen sich diese Ausdrücke zu den dort angegebenen Formen

$$\varepsilon_z = \frac{s_{22}s_{13} - s_{12}s_{23}}{s_{11}s_{22} - s_{12}^2} \frac{z}{R_h} + \frac{s_{11}s_{23} - s_{12}s_{13}}{s_{11}s_{22} - s_{12}^2} \frac{z}{R_v}.$$

Es wurde also das Ergebnis von [CHWF96] bestätigt und auf den allgemeinen Fall ausgeweitet.

### 4.2.3 Praktische Berechnung der Poisson-Zahl

Zumeist nimmt man bei der Berechnung der Reflexionskurve an, der gebogene Kristall verhalte sich wie ein isotroper Körper (z. B. in [UFGH93, CFSZ92]). Mit der Poissonzahl  $\nu$  erhält man ( $z = 0$  Mittelfläche im Kristall,  $z$  positiv: Kristalloberfläche)

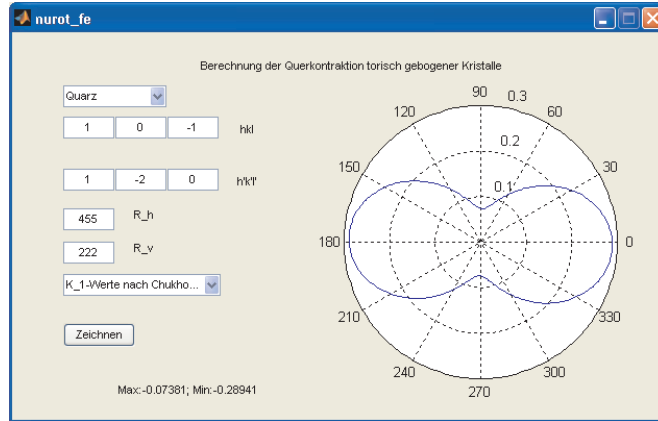
$$\varepsilon_z = z \frac{\nu}{1 - \nu} \left( \frac{1}{R_h} + \frac{1}{R_v} \right). \quad (4.7)$$

Ein elastisch anisotroper Stoff (wie jeder Kristall) hat allerdings keine definierte Poissonzahl. Formeln und Algorithmen, die auf dieser Gleichung beruhen, lassen sich dennoch verwenden. Wenn man diese Gleichung mit der, die aus der voll anisotropen Theorie folgt, gleichsetzt, kann man nach  $\nu$  auflösen. Diese „Poissonzahl“ hängt dann aber im Allgemeinen vom gewählten Kristallschnitt, der azimuthalen Orientierung des Kristalls und den Krümmungsradien ab. Setzt man nun Gleichungen 4.6 und 4.7 gleich, erhält man als Eingabe für isotrop rechnende Programme die Poisson-Zahl

$$\nu = \frac{A/R_h + B/R_v}{A/R_h + B/R_v + C(1/R_h + 1/R_v)}.$$

Die Matrix  $s_{ij}$  wird zumeist im rechtwinkligen kristallphysikalischen Bezugssystem tabelliert, die obige Rechnung wurde in einem Laborsystem durchgeführt, und die Angabe der Reflexionsebenen in der Form  $(hkl)$  bezieht sich auf das im Allgemeinen schiefwinklige kristallographische Koordinatensystem. Diese Umrechnungen sind zwar einfache Algebra, aber zumeist nicht mehr per Hand zu bewältigen. Dafür wurde ein MATLAB-Skript `nurot.m` entwickelt (siehe Abbildung 4.2), dessen Ergebnisse auch mit den drei in [CHWF96] angegebenen Beispielen Si (111), Quarz (10.0) und Quarz (10.1) überprüft wurden. Im Folgenden soll der Rechenweg des Programms angegeben werden.

- Die Umrechnung vom kristallphysikalischen auf das kristallographische Bezugssystem erfolgt, indem man die Basisvektoren des kristallographischen Systems  $\vec{a}_i$  (Basis des reziproken Raums  $\vec{a}_i^*$ ) mit den Basisvektoren des kristallphysikalischen Systems  $\vec{e}_i$  aufschreibt. Diese seien  $\vec{e}_1 = (1, 0, 0)$ ,  $\vec{e}_2 = (0, 1, 0)$ ,  $\vec{e}_3 = (0, 0, 1)$ . Die Längeneinheit ist dabei ohne Belang. Die Lage des kristallphysikalischen zum kristallographischen System ist für einen bestimmten Kristall fest, nach [Hau83] gilt die Konvention  $\vec{e}_1 \parallel \vec{a}_2^*$ ,  $\vec{e}_3 \parallel \vec{a}_3$ ; das



**Abbildung 4.2:** Benutzeroberfläche des Programms `nurot.m` zur Bestimmung der  $z$ -Abhängigkeit des Gitterparameters für verschiedene azimutale Lagen des gebogenen Kristalls.

kristallographische System  $\vec{a}_i$  ist ein Rechtssystem. Damit ist die Lage der drei Koordinatensysteme zueinander eindeutig bestimmt.

Zum Beispiel für Silizium

$$\begin{aligned}\vec{a}_1 &= 5,4307 \cdot \vec{e}_1 + 0 \cdot \vec{e}_2 + 0 \cdot \vec{e}_3 \\ &= (5,4307; 0; 0) \\ \vec{a}_2 &= (0; 5,4307; 0) \\ \vec{a}_3 &= (0; 0; 5,4307),\end{aligned}$$

und für Quarz

$$\begin{aligned}\vec{a}_1 &= (4,913; 0; 0) \\ \vec{a}_2 &= (-4,913/2; 4,913 \cdot \sqrt{3}; 0) \\ \vec{a}_3 &= (0; 0; 5,405).\end{aligned}$$

- Das Laborsystem  $\hat{e}_i$  erhält man, indem man die Oberflächennormale  $\vec{n} = h\vec{a}_1^* + k\vec{a}_2^* + l\vec{a}_3^*$  als  $\hat{e}_3$ -Achse wählt und eine  $\hat{e}_1$ -Richtung auszeichnet. Hat man die Normale der Netzebenenchar  $(h'k'l')$  als  $\hat{e}_1$ -Richtung gewählt ( $\hat{e}_1 \perp \hat{e}_3$ ), so erhält man wieder mit  $\hat{e}_1 = h'\vec{a}_1^* + k'\vec{a}_2^* + l'\vec{a}_3^*$  die Darstellung im kristallphysikalischen Koordinatensystem.
- Über eine Drehung dieser  $\hat{e}_1$ -Richtung um die Oberflächennormale  $\hat{e}_3$  erhält man die Koordinatensysteme zur Berechnung einer möglichen Variation der Poisson-Zahl für verschiedene Lagen der Kristalls zur horizontalen Ebene.

- Für die Umrechnung der elastischen Nachgiebigkeiten in die des nun bestimmten Laborsystems gilt wie für jeden Tensor

$$s'_{ijkl} = D_{im}D_{jn}D_{ko}D_{lp}s_{mnop},$$

wobei  $D$  die entsprechende Drehmatrix ist. Ihre Komponenten sind  $D_{ij} = \hat{e}_i \cdot \vec{e}_j$  ( $\hat{e}_i$ : Basisvektoren des Laborsystems;  $e_i$ : Basisvektoren des kristallphysikalischen Systems).

- Die elastischen Nachgiebigkeiten  $s_{ij}$  liegen in Matrixform (Voigt-Notation) vor, die sich nach [Pri04] gemäß folgender Tabelle in Tensorform  $s_{ijkl}$  umrechnen lassen. Nach erfolgter Drehung lässt sich daraus wieder die Voigt-Matrix gewinnen.

$$\begin{array}{lll} i = j & k = l & s_{\alpha\beta} = s_{ijkl} \\ i \neq j & k = l & s_{\alpha\beta} = 2s_{ijkl} \\ i \neq j & k \neq l & s_{\alpha\beta} = 4s_{ijkl} \end{array}$$

### 4.3 Elastizitätstheorie ohne geometrische Näherung

Wie in Abschnitt 4.2.1 erwähnt, ist die geometrische Näherung der Elastizitätstheorie nicht mehr zulässig, wenn die Durchbiegung des Kristalls in die Größenordnung seiner Dicke kommt. Die Form von Gleichung 4.3 ohne diese geometrische Näherung ist praktisch schwer zu behandeln, sodass ein anderer Weg gefunden werden muss.

Nach [GZ68] lässt sich die Deformation als Differenz der Metriken zweier gekrümmter Koordinatensysteme beschreiben.

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2}(g'_{ij} - g_{ij}) \quad (4.8)$$

Dazu parametrisiert man den undeformierten Körper durch das, ggf. gekrümmte, Koordinatensystem  $\Sigma(x_1, x_2, x_3)$  mit der Metrik  $g_{ij}$ . Der deformierte Körper wird dann so durch das Koordinatensystem  $\Sigma'(x'_1, x'_2, x'_3)$  mit der Metrik  $g'_{ij}$  beschrieben, dass  $(x, y, z)$  und  $(x', y', z')$  das gleiche Massenelement  $dm$  im deformierten und undeformierten Körper bezeichnen.

Beide Koordinatensysteme  $\Sigma$  und  $\Sigma'$  sind dabei in den dreidimensionalen euklidischen Raum eingebettet. Damit sind alle Komponenten des (dreidimensionalen) Riemann'schen Krümmungstensors  $\tilde{R}_{ijkl}$  für beide Koordinatensysteme  $\Sigma$  und  $\Sigma'$  gleich 0.

Für den ungebogenen Kristall bietet sich ein rechtwinkliges Koordinatensystem (d. h.  $g_{ij} = \delta_{ij}$ ) an, bei dem die  $x_3$ -Achse senkrecht auf der Kristalloberfläche steht. Greift man sich aus dem gebogenen Kristall nun eine Ebene parallel zur Oberfläche heraus, so ist diese durch das zweidimensionale Koordinatensystem  $S'(x'_1, x'_2)$  mit der Metrik  $g'_{\mu\nu}$  beschrieben<sup>2</sup>. In jedem Ort auf dieser Fläche gibt es einen maximalen und einen minimalen Krümmungsradius  $R_h$  und  $R_v$ , die im allgemeinen ortsabhängig sind.

<sup>2</sup>Lateinische Indizes laufen von 1 bis 3, griechische nur von 1 bis 2.

Es sollen im Folgenden nur die Fälle Kugel ( $R_h = R_v = R = \text{const}$ ), Zylinder ( $R_v = R = \text{const}$ ,  $R_h = \infty$ ), Rotationsellipsoid ( $R_h \neq R_v$ ,  $R_h = \text{const}$ ,  $R_v = \text{const}$ ) und Ebene ( $R_h = R_v = \infty$ ) untersucht werden. Beim Torus ist der eine Radius ortsabhängig (siehe Abbildung 1.1), diese Abhängigkeit ist jedoch für kleine Vertikalausdehnungen ( $\Delta y \ll R_v$ ) schwach und kann in diesem Zusammenhang vernachlässigt werden.

Das inverse Produkt der Krümmungsradien heißt *Gauß'sche Krümmung*  $K$

$$K = \frac{1}{R_1 R_2}.$$

(Für Zylinder und Ebene gilt  $K = 0$ .) Die einzige unabhängige Komponente des nicht verschwindenden *zweidimensionalen* Riemannstensors  $\tilde{R}'_{\mu\nu\kappa\lambda}$  ist gegeben durch [FK03]

$$\tilde{R}'_{1212} = (g'_{11}g'_{22} - g'_{12}g'_{21})K, \quad (4.9)$$

wobei der Riemannstensor über die Christoffelsymbole  $\Gamma_{\mu\nu\kappa}$  und die Christoffelsymbole über die Metrik  $g'_{\mu\nu}$  definiert sind.

$$\tilde{R}'_{\kappa\alpha\beta}{}^\lambda \equiv \partial_\alpha \Gamma_{\beta\kappa}^\lambda - \partial_\beta \Gamma_{\alpha\kappa}^\lambda + \Gamma_{\beta\kappa}^\mu \Gamma_{\alpha\mu}^\lambda - \Gamma_{\alpha\kappa}^\mu \Gamma_{\beta\mu}^\lambda$$

$$\Gamma_{\alpha\lambda\kappa} = \frac{1}{2}(-\partial_\lambda g'_{\alpha\kappa} + \partial_\alpha g'_{\lambda\kappa} + \partial_\kappa g'_{\alpha\lambda})$$

Die Aussage, dass sich die Krümmung  $K$  einer Fläche auf ihre Metrik, also nur auf Abstands- und Winkelbegriffe innerhalb der Fläche, zurückführen lässt, heißt *Theorema egregium* und geht auf Gauß zurück [FK03].

Legt man also die Metrik des ungebogenen Kristalls auf  $g_{ij} = \delta_{ij}$  fest, und setzt Gleichung 4.8 in die Definition der Christoffelsymbole und diese in die des Riemannstensors ein, erhält man eine Gleichung für die Komponenten der Deformation  $\varepsilon_{11}$ ,  $\varepsilon_{22}$  und  $\varepsilon_{12}$  in dieser Fläche. Die Komponenten der Deformation sind kleine Größen und ihre Produkte können vernachlässigt werden<sup>3</sup>.

Die entstehenden Ausdrücke sind sehr unhandlich und wurde mit Hilfe des Programms MathTensor (beschrieben in [PC94]) aufgestellt. Das Endergebnis ist

$$K = 2 \frac{\partial^2 \varepsilon_{12}}{\partial x_1 \partial x_2} - \frac{\partial^2 \varepsilon_{11}}{\partial x_2^2} - \frac{\partial^2 \varepsilon_{22}}{\partial x_1^2},$$

oder, in Voigt'scher Notation,

$$K = \frac{\partial^2 \gamma_{xy}}{\partial x \partial y} - \frac{\partial^2 \varepsilon_x}{\partial y^2} - \frac{\partial^2 \varepsilon_y}{\partial x^2}. \quad (4.10)$$

Zwei entsprechende Gleichungen erhält man auch an den beiden Schnitten  $x_1 = \text{const}$  und  $x_2 = \text{const}$ , diese haben jeweils eine Gauß'sche Krümmung  $K = 0$ .

---

<sup>3</sup>Im Gegensatz zu Produkten von Komponenten des Verschiebungsvektors  $\vec{u}$ , diese sind im Falle starker Durchbiegungen *nicht* klein.

$$0 = \frac{\partial^2 \gamma_{xz}}{\partial x \partial z} - \frac{\partial^2 \varepsilon_x}{\partial z^2} - \frac{\partial^2 \varepsilon_z}{\partial x^2} \quad (4.11)$$

$$0 = \frac{\partial^2 \gamma_{yz}}{\partial y \partial z} - \frac{\partial^2 \varepsilon_y}{\partial z^2} - \frac{\partial^2 \varepsilon_z}{\partial y^2}. \quad (4.12)$$

Bis auf die Konstante  $K$  entsprechen diese Gleichungen formal den im Falle geometrischer Näherung gültigen Kompatibilitätsbedingungen (Gleichung 4.4)  $\eta_{11} = 0$ ,  $\eta_{22} = 0$ ,  $\eta_{33} = 0$ . Das heißt, für den Fall des zylindrisch gebogenen Kristalls ( $K = 0$ ) gelten die in Abschnitt 4.2.2 erhaltenen Ergebnisse unverändert. Für Gauß'sche Krümmungen ungleich 0 aber muss eine mindestens quadratische Abhängigkeit der Komponenten der Deformation von den Koordinaten  $x$  und  $y$  vorhanden sein, um Gleichung 4.10 zu erfüllen.

Geht man nun näherungsweise davon aus, dass diese nun notwendige nichtlineare  $(x, y)$ -Abhängigkeit höchstens quadratisch ist und auf Grund der Symmetrie von Torus und Sphäre nicht linear sein kann, so kann man für die linear mit den Deformationen verbundenen Spannungen schreiben

$$\sigma_i = a_i^x x^2/2 + a_i^y y^2/2 + a_i^z/2z^2 + bz + c.$$

In geometrischer Näherung erhält man  $\sigma_z = 0$ ,  $\tau_{xz} = 0$ ,  $\tau_{yz} = 0$  über das ganze Volumen. Auf der Kristalloberfläche müssen diese Größen aber auch im allgemeinen Fall stets 0 sein, da dort keinerlei Oberflächenkräfte angreifen. Damit liegt die Vermutung nahe, dass sie auch im allgemeinen Fall über das komplette Kristallvolumen vernachlässigbar klein sind. Setzt man von den verbleibenden sechs quadratischen Konstanten

$$a_y^x = \partial^2 \varepsilon_x \partial y^2 = -v_1 K \quad a_x^y = \partial^2 \varepsilon_y \partial x^2 = -v_2 K,$$

also beschreibt man sie durch ihren „Anteil“ an der Erfüllung von Gleichung 4.10, so erhält man aus den „Kompatibilitätsgleichungen“ 4.10 und den Kraftgleichungen 4.2.1 die Aussage  $1 = v_1 + v_2$  sowie alle offenen Konstanten. Insbesondere gilt

$$a_z^x = \frac{\partial^2 \varepsilon_x}{\partial x^2} = -v_2 K \frac{s_{23}}{s_{22}} \quad a_z^y = \frac{\partial^2 \varepsilon_y}{\partial y^2} = -v_1 K \frac{s_{13}}{s_{11}}. \quad (4.13)$$

Wie man leicht nachrechnet, kommen diese Terme für Krümmungen  $K = 1/(R_h R_v)$ ,  $R_h \approx R_v \approx 500$  mm bis in die Größenordnung  $10^{-4}$  (an der Stelle  $x = 10$  mm). Eine solchen Dehnung entspricht bei einem Braggwinkel von etwa  $80^\circ$  eine Braggwinkelveränderung von immerhin fast 120 Winkelsekunden. Die hier vermutete quadratische Ortsabhängigkeit des Braggwinkels ist also ein wichtiger Effekt, der auf dem Rowlandkreis sogar gegenüber der geometrischen Braggwinkelabweichung  $\sigma$  (siehe Abschnitt 1.1) dominant sein kann. Das heißt, dass die in Abschnitt 1.2 angegebene Effizienzformel nicht vollständig ist, da der Braggwinkel  $\theta_B$  in Gleichung 1.4 ortsabhängig ist. Das Argument der Reflexionskurve  $C$  muss um einen Term  $\Delta\theta_B(\alpha, \Phi)$  korrigiert werden

$$\Delta\theta_B(\alpha, \Phi) = \left(-v_2 K \frac{s_{23}}{s_{22}}\right) \frac{\alpha^2 l_a^2}{2 \sin^2 \theta_0} + \left(-v_1 K \frac{s_{13}}{s_{11}}\right) \Phi^2 l_a^2, \quad (4.14)$$

wobei allerdings die Werte von  $v_1$  und  $v_2$  unbekannt sind ( $v_1 + v_2 = 1$ ). Veränderungen der Form der Reflexionskurve sind hingegen nicht zu erwarten, denn diese ist empfindlich auf die Ableitung des Netzebenenabstandes entlang des Strahlwegs. Man macht sich aber leicht klar, dass die Beträge der  $z$ -Ableitung der Komponenten des Deformationstensors um Größenordnungen über denen der  $x$ - und  $y$ -Ableitungen liegen.

## 4.4 Reflexionskurvenmessung an einem zylindrisch gebogenen Kristall

Prägt man einem dünnen, rechteckigen, freien Kristall über ein an zwei gegenüberliegende Stirnflächen angreifendes Biegemoment einen Krümmungsradius  $R$  auf, so bildet sich senkrecht zu dieser Krümmung eine zumeist unerwünschte *antiklastische* Krümmung, beschrieben durch den Krümmungsradius  $R_a$  aus. Bei Anwendbarkeit der geometrischen Näherung gilt (tiefer gehende Betrachtungen dazu z. B. in [Kri93])

$$\frac{R_a}{R} = \frac{s_{12}}{s_{11}}.$$

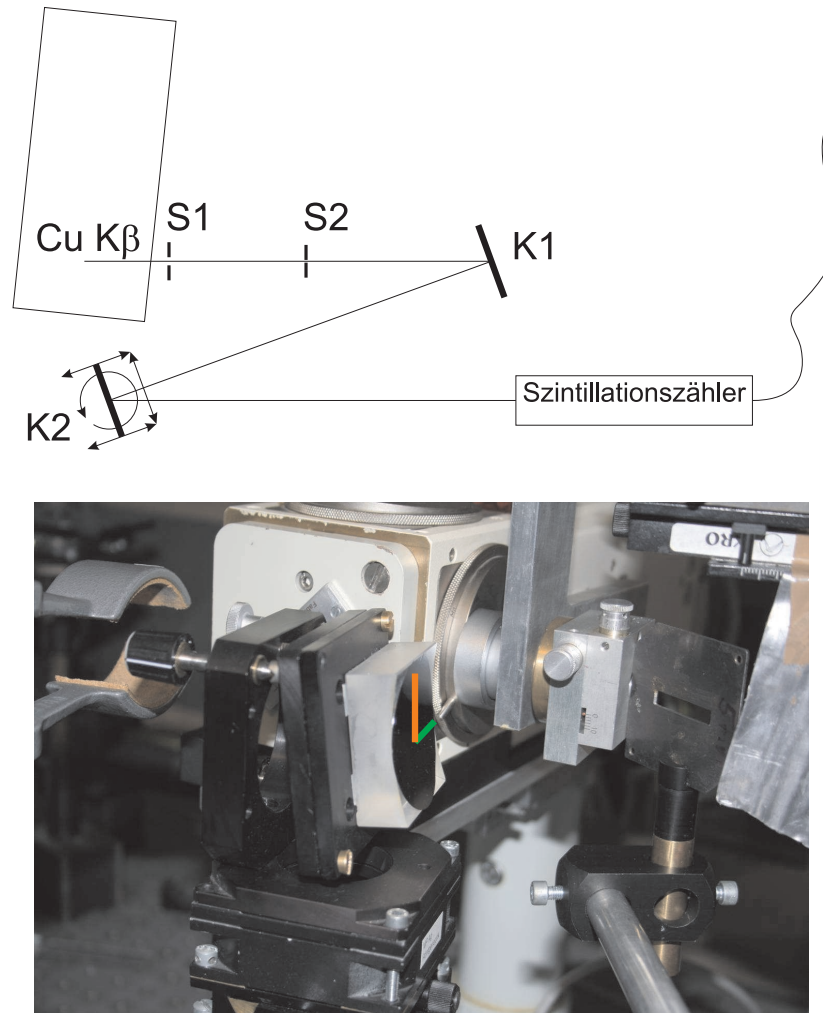
Dieser Quotient ist größer als  $-1/2$  und zumeist negativ, sodass die antiklastische Biegung schwächer als die Hauptkrümmung ist und (meist) entgegengesetztes Vorzeichen hat. Der frei gebogenen Kristall ist also sattelförmig. Bringt man nun einen so gebogenen Kristall auf eine Zylinderform mit einem Krümmungsradius von  $R$ , aber keiner dazu senkrechten Krümmung, so erwartet man intuitiv, dass in der Nähe der Kristallränder senkrecht zur Zylinderachse hohe Deformationen und Spannungen auftreten.

Im gebogenen Zustand ist nach der Betrachtung im vorhergehenden Abschnitt aber keinerlei solche Abhängigkeit vom Ort auf der Kristallfläche zu erwarten. Es soll also überprüft werden, ob das integrale Reflexionsvermögen und die Form der Reflexionskurve eines zylindrisch gebogenen Kristalls eine Abhängigkeit vom bestrahlten Ort aufweist. Die gewählte Methode erlaubt nicht, den Nullpunkt der Winkelskala genau zu bestimmen und so kleine Veränderung des absoluten Braggwinkels zu detektieren.

### 4.4.1 Experiment

Die Messungen wurden an einem  $(n, -n)$  Doppelkristalldiffraktometer (DKD) durchgeführt. Das Prinzip ist in Abbildung 4.3 dargestellt. Beide Kristalle sind Galliumarsenid mit (001)-Oberfläche, ausgenutzt wird der symmetrische (008)-Reflex von  $\text{Cu-K}\beta$ -Strahlung mit einem Braggwinkel von  $80^\circ$ . Der erste Kristall K1 ist flach und dick, der zweite (K2, laufende Nummer 170) ist auf eine hohlzylindrische Form mit einem Radius von  $R_v = 97 \text{ mm}$  gebogen und ist etwa  $80 \mu\text{m}$  dick, seine Zylinderachse liegt in der horizontalen Ebene.





**Abbildung 4.3:** Doppelkristalldiffraktometer (DKD). Oben: Prinzipskizze; unten Foto. In der Röhre wird Cu-K $\beta$  Strahlung erzeugt, diese wird durch die Spalte S1 und S2 (beide horizontal und vertikal) kollimiert. Die Strahlung wird an einem ungebogenen (K1) und einem gebogenen Galliumarsenidkristall (K2) gebeugt und mit Hilfe eines Szintillationszählers detektiert. Kristall K2 ist auf einem Goniometer angebracht, das wiederum auf einem zur Strahlrichtung von K1 zu K2 parallelen Schlitten gelagert ist. Neigung, horizontale Verschiebung und Höhe im Strahl sind einstellbar.

Diese Anordnung ist nach [UMF97] genau dann *achromatisch*, wenn für die Quellentfernung (in der Abbildung der Abstand von S2 zu K2 über K1.) gilt

$$l_a = \frac{2R_v}{\sin \theta_B} = 197 \text{ mm.}$$

Achromasie bedeutet, dass ein auf dem ersten Kristall mit einer bestimmten geometrischen Braggwinkelabweichung  $\sigma$  auftreffender Strahl bei der Reflexion am zweiten Kristall dasselbe  $\sigma$  vorfindet. Man kann zeigen [UFGH93], dass dann für eine Strichquelle in horizontaler Ebene die Reflexionskurve des Aufbaus beim Durchdrehen des Kristalls K2 die Faltung der Reflexionskurven beider Kristalle ist.

Um den Effekt der vertikalen Quellverbreiterung zu unterdrücken, ist der Vertikalspalt (Blenden horizontal) in S2 auf 0,2 mm zuge dreht, S1 und S2 horizontal sind 1 mm.

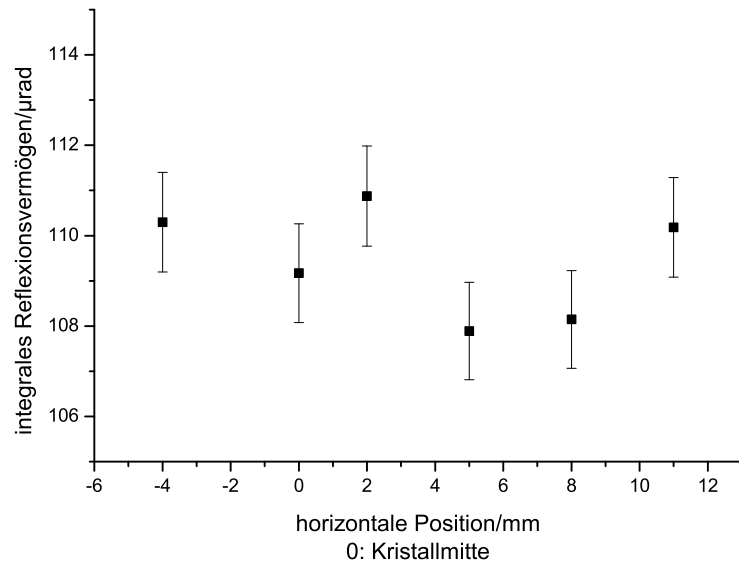
Durch Hinzufügen und Herausnehmen von vertikalen Abstandsstücken in der Kristallhalterung konnten verschiedene Höhen, über einen Schlitten parallel zur Zylinderachse verschiedene horizontale Kristallorte in den Strahl gebracht werden.

Die erhaltene Kurve wurde mit der an der Stelle des zweiten Kristalls auftreffenden Strahlung  $I_0$  normiert. Von der reflektierten Strahlung erreicht durch Absorption in Luft nur ein Anteil von etwa 0,84 den Detektor. Für die Messung der horizontalen Abhängigkeit, die 30 mm hinter denen für die vertikale Abhängigkeit durchgeführt wurde, ist ein weiterer Faktor von 0,976 zu berücksichtigen. Die bei 40 kV betriebene Röntgenröhre erzeugt neben der ausgenutzten charakteristischen Linienstrahlung auch Bremsstrahlung mit einem spektralen Maximum bei 20 kV, die ebenfalls auf den Kristall K1 fällt. Dort wird sie von dem dicken Galliumarsenidkristall fast vollständig absorbiert und zu Fluoreszenzstrahlung umgewandelt. Die K-Kanten von Gallium und Arsen liegen bei 10,4 keV bzw. 11,9 keV, sodass die Arsen-Fluoreszenzstrahlung zu einem großen Teil in Gallium-Fluoreszenzstrahlung umgewandelt wird. Diese Strahlung wird isotrop in den Raum abgestrahlt und verfälscht die  $I_0$ -Messung. Ihr Anteil am Messwert wurde zu 0,16 bestimmt, indem die  $K_\beta$ -Strahlung von Kristall K1 durch Verstellen des Braggwinkels ausgeblendet wurde.

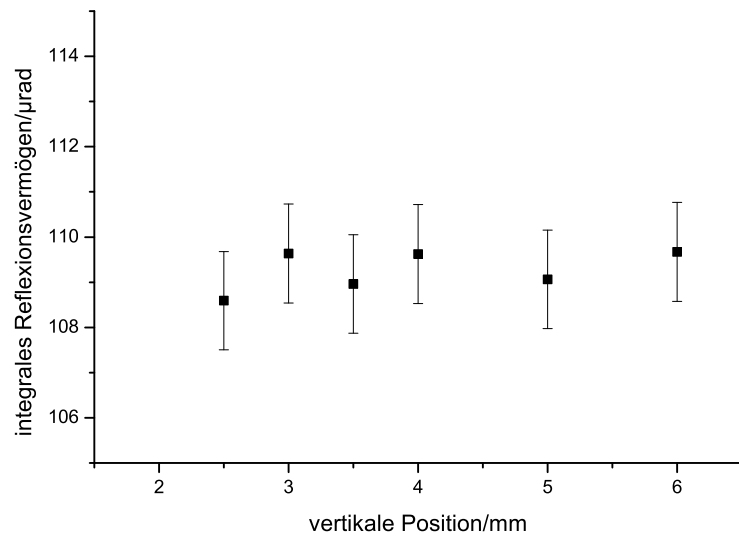
Abbildungen 4.4 und 4.5 zeigen die bestimmten integralen Reflexionsvermögen. *Es ist keine Variation über die Kristalloberfläche erkennbar.*

In den Diagrammen ist ein statistischer Fehler von 1% angenommen, wie er auftritt, wenn man eine gleiche Messung zu verschiedenen Zeitpunkten an der Anlage wiederholt. Eine wichtige Ursache dafür sind die an den Messtagen verschiedenen Temperaturen und Luftdrücke, die über die Luftabsorption einen Fehler von etwa 0,5% einbringen. Unsicherheit bei der Messung der Untergundstrahlung, beim Abschätzen des Anteils der Fluoreszenzstrahlung und bei der Strecke der Luftabsorption von K2 zum Detektor erzeugen einen für alle Messpunkte gleichen systematischen Fehler von zusammen 5 bis 10%. Das Integral unter der mit dem Programm DIXI [HOF98] bestimmten theoretischen Kurve stimmt mit  $110 \mu\text{rad}$  mit dem experimentellen integralen Reflexionsvermögen überein.

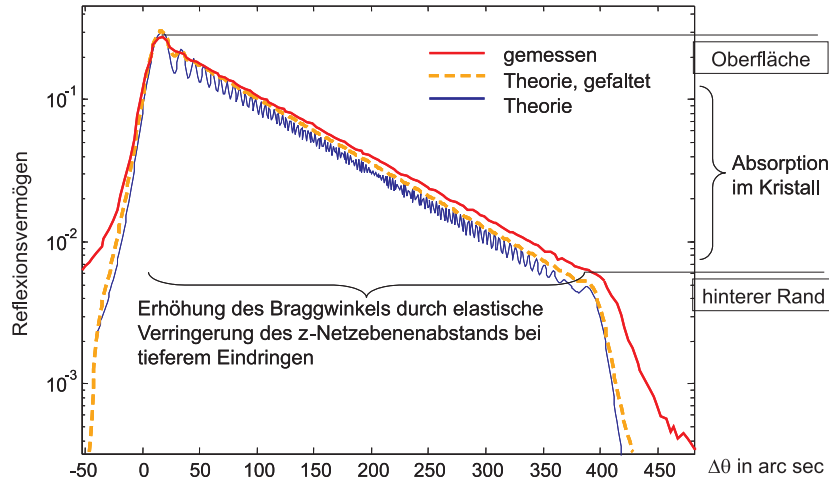
Bei der Form der gemessenen Reflexionskurven gibt es ebenfalls keinen Hinweis auf eine Ortsabhängigkeit. Eine typische Kurve ist in Abbildung 4.6 angegeben. Man erkennt einen ex-



**Abbildung 4.4:** Integrales Reflexionsvermögen an einem von-Hámos-Zylinderkristall. Ortsabhängigkeit senkrecht zur horizontalen Ebene (horizontal Kristallmitte).



**Abbildung 4.5:** Integrales Reflexionsvermögen an einem von-Hámos-Zylinderkristall. Ortsabhängigkeit in der horizontalen Ebene (vertikal Kristallmitte).



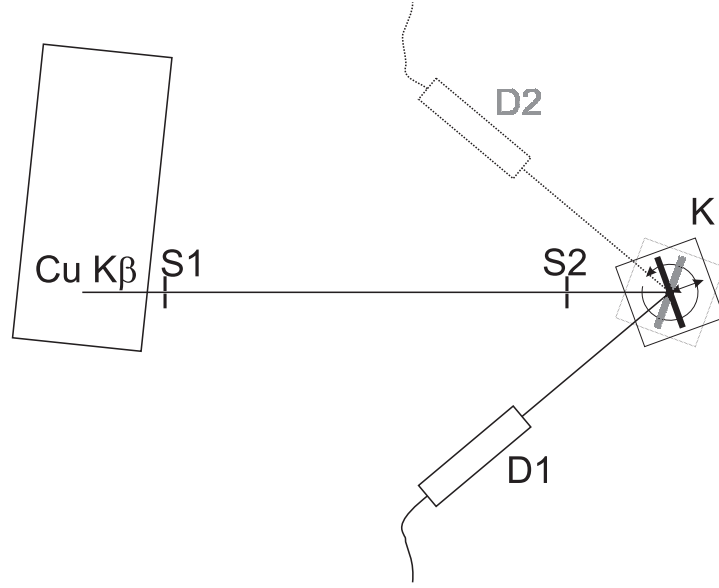
**Abbildung 4.6:** Reflexionskurve von Galliumarsenid (800), Cu-K $\beta$ -Strahlung, 80° Braggwinkel, zylindrisch gebogen  $R = 97$  mm. Gezeichnet sind die berechnete Kurve, die theoretisch zu erwartende Messkurve (Faltung mit der Reflexionskurve eines flachen Kristalls) und die gemessene Kurve. Derartige Kurven wurden an einer Reihe von horizontalen und vertikalen Positionen aufgenommen. Es wurden keine Unterschiede zu der abgebildeten Kurve festgestellt.

ponentiellen Abfall der Reflexionskurve zu höheren Einfallswinkeln. Das Kristallgebiet, in dem die Reflexion stattfindet, liegt weiter hinten und die Strahlen müssen ein größeres, absorbierendes, Kristallvolumen durchdringen. Man liest eine Winkelveränderung von 386" ab, was mit  $\Delta\theta = \Delta\varepsilon_z \tan\theta_B$  und Gleichung 4.7 ( $\nu = 0,31$ ) einer Kristalldicke von 71  $\mu\text{m}$  entspricht. Betrachtet man das Intensitätsverhältnis von 44 für an der Oberfläche und an der Rückseite reflektierte Strahlung, erhält man mit einer Absorption von  $-268/\text{cm}$  eine Kristalldicke von 72  $\mu\text{m}$ . Wie man an der Kurve sieht, können sowohl Intensitätsverhältnis als auch Winkelbereich nur abgeschätzt werden. Der Hersteller gibt eine Kristalldicke von 80  $\mu\text{m}$  an.

Nach den Überlegungen in Abschnitt 4.3 sollten sich bei erzwungen gebogenen Kristallen im Allgemeinen keinerlei  $(x, y)$ -Abhängigkeit von Reflexionskurvenform und integralem Reflexionsvermögen einstellen. Für diesen Aufbau, in dem nur zylindrisch gebogene Kristalle gemessen werden können, wurde dies experimentell bestätigt.

## 4.5 Ortsabhängige Messung des zentralen Braggwinkels

Die in Abschnitt 4.3 mit Gleichung 4.14 gemachte Vorhersage, dass der zentrale Braggwinkel einer Reflexionskurve auf einem großen, gebogenen Kristall vom Einstrahlort auf der Oberfläche abhängt, wurde experimentell untersucht. Die Veränderungen wurden mit einem Verfahren bestimmt, das der Bond-Methode zur absoluten Bestimmung der Gitterparameter ähnelt [Bon60, Pri04]. Untersucht wurde der Galliumarsenid (008)-Reflex bei Cu-K $\beta$ -Strahlung,  $\theta_B = 80^\circ$ . Der rechteckige Kristall mit Kantenlängen  $\Delta x = 30$  mm,  $\Delta y = 20$  mm hat die Krümmungsradien



**Abbildung 4.7:** Aufbau zur Messung der Veränderung des Braggwinkels über die Kristalloberfläche. Die Strahlung wird durch zwei Spalte (1 mm vertikal, 0,1 mm horizontal geöffnet, Abstand 41 cm) kollimiert und wird von dem drehbaren Kristall in die (festen) Detektor D1 oder D2 reflektiert, die jeweils große Eintrittsfenster haben. Der Kristall muss in der horizontalen Ebene verschiebbar sein, um die zu untersuchende Stelle in das Drehzentrum des Goniometers zu bringen.

$R_h = 450$  mm,  $R_v = 306$  mm. Absolute Braggwinkel sollen, im Gegensatz zur Originalarbeit [Bon60], hier nicht bestimmt werden, sondern nur deren Veränderung abhängig von der untersuchten Stelle des gebogenen Kristalls.

**Messprinzip** Der Aufbau ist in Abbildung 4.7 dargestellt. Man dreht den Kristall je etwa an eine der beiden Stelle, an der für die zentrale Wellenlänge der Spektrallinie die Braggbedingung exakt erfüllt ist und misst um diese Position herum in den Detektoren D1 bzw. D2 die komplette Beugungskurve. Die Form der verwendeten Cu- $K_\beta$ -Linie ist in [HFD<sup>+</sup>97] genau beschrieben, hier reicht die Aussage dass sie eine Halbwertsbreite von  $\Delta E = 5,92$  eV hat. Mit der Wellenlängenabhängigkeit des Braggwinkels  $\omega_B = (\Delta E/E) \tan \theta_{B0}$ ,  $\omega_B = 693$  arcsec erkennt man, dass sie in diesem Aufbau gegenüber der horizontalen Divergenz dominant ist, die Beugungskurve also die Linienform widerspiegelt.

**Fehlerquellen** In diesem Aufbau muss der Netzebenennormalenvektor exakt in der horizontalen Ebene liegen. Es gilt für den scheinbaren Braggwinkel  $\theta'_B$  bei einem Winkel  $\Delta$  zwischen horizontaler Ebene und Netzebenennormalenvektor [Bon60]

$$\sin \theta_B = \cos \Delta \sin \theta'_B.$$

Die Neigung ist also dann richtig justiert, wenn  $\theta'_B$  minimal wird.

Für die in [Bon60] behandelten flachen Kristalle eliminiert dieser Aufbau den Fehler, der dadurch entsteht, dass die Kristalloberfläche um einen Betrag  $\Delta z$  vom Drehzentrum entfernt ist (die Exzentrizität). Bei gebogenen Kristallen ist das *nicht* der Fall. Man erhält geometrisch leicht, dass durch die Exzentrizität der beleuchtete Fleck auf dem Kristall um einen Betrag  $2\Delta x$  wandert und sich dadurch der Winkel zwischen einfallendem Strahl und Netzebene, also der Nullpunkt der Beugungskurve, um  $2w$  verschiebt.

$$\Delta x = \Delta z \tan(90^\circ - \theta_B); \quad w = \frac{\Delta x}{R}$$

So lange dieser die Null verschiebende Effekt konstant ist, ist er ohne Belang. Dies erreicht man, indem man die (unbekannte) Entfernung der gewölbten Kristalloberfläche zum Drehzentrum  $\Delta z$  (Größenordnung 0,1 mm) konstant hält. Man kann abschätzen, dass es deswegen aber notwendig ist, an dem verwendeten, nach innen gewölbten Kristall bei Messung am Rand ihn um einige Mikrometer nach hinten zu verschieben. Die geringe Genauigkeit des Schlittens ( $\approx 20 \mu\text{m}$ ) bringt über  $\gamma$  einen Fehler von etwa 2 arcsec in die Messung der Veränderung des Braggwinkels am verwendeten Kristall.

Eine weitere experimentelle Schwierigkeit besteht darin, dass der Schrittmotor, der das Goniometer antreibt, eine variierende Schrittweite besitzt und zudem der Verdacht besteht, dass bei einer Fahrt um einige Grad auch einige Schritte übersprungen werden. Deshalb wurde am Beginn und Ende einer Messkurve (etwa  $0,75^\circ$  breit) der absolute Winkel mit einem auf  $(5 \cdot 10^{-5})^\circ = 0,18''$  genauen Winkelmesssystem der Firma Heidenhain aufgenommen.

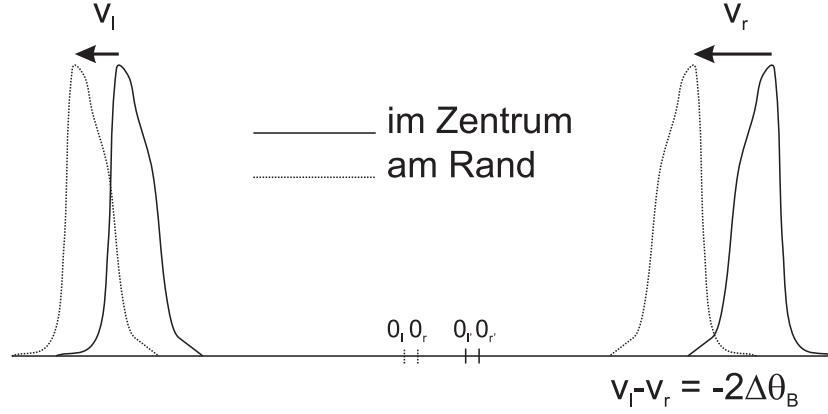
Der Braggwinkel ist über die Wärmeausdehnung des Kristalls temperaturabhängig. Es gilt ( $\alpha_{300\text{K}} = 5,73 \cdot 10^{-6} \text{K}^{-1}$ , unabhängig vom Kristallschnitt [Bla82])

$$\theta_B^{T_1} - \theta_B^{T_0} = -(T_1 - T_0)\alpha \tan \theta_B \approx 6,7 \text{ arcsec}.$$

Für alle aufgenommenen Messkurven wurde also Anfangs- und Endtemperatur bestimmt. Die Korrektur erfolgte dann unter der Annahme, dass während der Messung (300 Punkte, je 10 s integriert, etwa 50 min) eine Durchschnittstemperatur bestand.

**Auswertung** In Abbildung 4.8 ist das Prinzip der Auswertung dargestellt. Alle gemessenen Kurven werden mit den Daten des absoluten Winkelmessers in Winkelskala umgerechnet und die jeweils zueinander gehörigen Kurven an einer Position auf dem Kristall zu einer doppelten Kurve zusammengefasst. Die doppelte Kurve an der zu untersuchenden Position wird dann einen Winkel  $v_l$  bzw.  $v_r$  so verschoben, dass die Messwerte bei negativen Winkeln bzw. positiven Winkeln jeweils zur Deckung kommen.

Es tauchen vier Nullpunkte auf, die durch die Größen  $w$  und  $p$  beschrieben werden. Die Kurvenverschiebung durch die Krümmung der Oberfläche, die den Winkel von Strahl zu Oberfläche abhängig von der horizontalen Position verschiebt, ist  $w = x/R$ . Die Exzentrizität erzeugt einen zwischen der Messung auf beiden Seiten verschobenen Nullpunkt ( $p$ ). Ein Index 0 bedeutet Nullmessung, 1 die Messung an der zu untersuchenden Stelle. Index  $l$  bezieht sich auf die



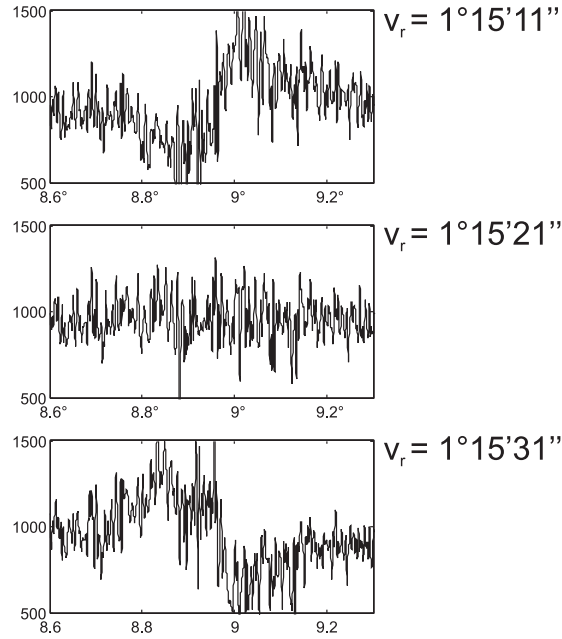
**Abbildung 4.8:** Messung veränderlicher Braggwinkel über die Kristalloberfläche, Prinzip der Auswertung (nicht maßstäblich). Es gibt vier Nullpunkte, für jede Messkurve einen. Dabei müssen die beiden Nullpunkte der an einer Position gemessenen linken und rechten Kurven einen festen Abstand  $p_l - p_r$  haben. In der Differenz der Verschiebungen  $v_l - v_r$  fallen alle Nullpunktseffekte heraus.

negative Seite einer doppelten Messkurve,  $r$  auf die positive.  $T_n$  ist eine beliebige Bezugstemperatur (hier 25 °C). Man erkennt, dass die  $p$  nur dann aus der Rechnung verschwinden, wenn die Exzentrizität konstant gehalten wird, also  $p_r^1 - p_l^1 = p_r^0 - p_l^0$ .

$$\begin{aligned}
 v_r &= (90^\circ - \theta_{B1r}^{T_{1r}}) - w - p_r^1 - \\
 &= (90^\circ - \theta_{B0r}^{T_{0r}}) - p_r^0 \\
 v_l &= -(90^\circ - \theta_{B1l}^{T_{1l}}) - w - p_l^1 + \\
 &= (90^\circ - \theta_{B0l}^{T_{0l}}) - p_l^0 \\
 v_l - v_r &= \theta_{B1l}^{T_{1l}} - \theta_{B0l}^{T_{0l}} + \theta_{B1r}^{T_{1r}} - \theta_{B0r}^{T_{0r}} \\
 2(\theta_{B1}^{T_n} - \theta_{B0}^{T_n}) &= v_l - v_r - \text{Temp. Kor.}
 \end{aligned} \tag{4.15}$$

Alle Effekte, die durch die vier mit den  $w$  und  $p$  beschriebenen Nullpunkte herrühren, werden durch die Differenzbildung eliminiert. Weitere Fehlerquellen beim Bondverfahren (Lorentz-Polarisationsfaktor, Brechung, Divergenz, Justageabweichungen von Kollimator und Kristall [Bon60, Pri04]) beeinflussen nur das Ergebnis einer absoluten Braggwinkelbestimmung, nicht aber die hier bestimmten Abweichungen.

Die Verschiebungen  $v_l, v_r$  lassen sich genau bestimmen, indem man die beiden grob übereinander gelegten Kurven voneinander abzieht und die Verschiebungen fein variiert, bis die Differenz konstant ist. (Die verbleibende, gegenüber der Zählrate kleine Konstante ist ein Unterschied im Untergrund und ohne Bedeutung.) Wie Abbildung 4.9 zeigt, lassen sich so die Verschiebungen mit einem Fehler von etwa 5 Winkelsekunden bestimmen.



**Abbildung 4.9:** Differenzen von übereinander geschobenen Messkurven. Übereinander gelegt sind der rechte Arm an Position 0 mm und 10 mm. Man erkennt, dass man die Kurven mit einer Genauigkeit von etwa 5 Winkelsekunden zur Deckung bringen kann. (Zählrate im Maximum etwa 22 000.)

**Ergebnis** Die ausgewerteten Messdaten sind in Abbildung 4.10 dargestellt. Der quadratische Parameter  $a_z^x$  aus Gleichung 4.14 ist

$$a_z^x = (-2,4'' \pm 0,4'') \text{ mm}^{-2},$$

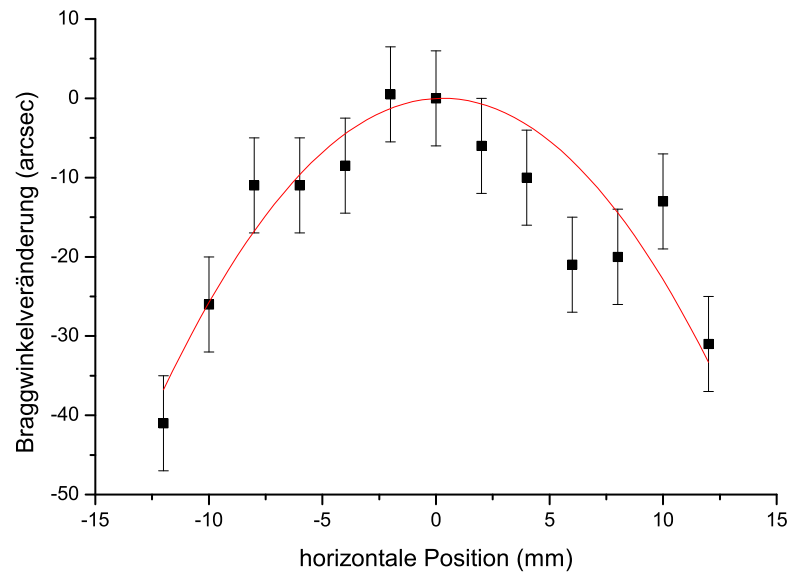
was bei einer Krümmung von

$$K = 1/(450 \cdot 306 \text{ mm}^2) = (7,26 \cdot 10^{-6}) \text{ mm}^{-2} = 1,50'' \text{ mm}^{-2}$$

in der Größenordnung dem in Gleichung 4.13 gegebenen Ausdruck entspricht.

Die vorhergesagte Ortsabhängigkeit des Braggwinkels wurde damit nachgewiesen und ihre Größenordnung bestätigt. Mit Abweichungen von bis zu  $50''$  ist dieser Effekt gegenüber der geometrischen Braggwinkelabweichung  $\sigma$  (in diesem Fall bei einem symmetrischen Braggwinkel von  $80^\circ$  auf dem Rowlandkreis am horizontalen Kristallrand  $\sigma = 19,6''$ ) *nicht vernachlässigbar*.





**Abbildung 4.10:** Ortsabhängige Braggwinkelveränderung an einem gebogenen Kristall in horizontaler Ebene. Galliumarsenid, symmetrischer (800)-Reflex, Cu- $K_\beta$ -Strahlung,  $\theta_B = 80^\circ$ , Krümmungsradien  $R_h = 450$  mm,  $R_h = 306$  mm;  $\Delta x = 30$  mm,  $\Delta y = 20$  mm. Statistischer Fehler entsteht bei der Bestimmung des optimalen Überlappung zweier Messkurven sowie durch das Nachführen des Drehzentrums.

## Zusammenfassung

Ziel der Arbeit war es, Kristalle mit hoher Photoneffizienz für eine konkrete Anwendung vorzuschlagen und die dafür notwendigen Kriterien weiter zu entwickeln.

Die dafür mit einzubeziehenden koplanar asymmetrischen Reflexe konnten mit den in der Literatur angestellten theoretischen Überlegungen nicht vollständig behandelt werden. Aus diesem Grund wurden die bereits bekannten Überlegungen zur Braggwinkelabweichung und zur Photoneffizienz so erweitert, dass sie als Spezialfall einer asymmetrischen Reflexion mit Asymmetriewinkel Null erscheinen. Ergebnis dieser Überlegungen ist, dass sich nur in Spezialfällen höhere Photoneffizienzen erreichen lassen. In den beiden konkreten Anwendungsfällen sind die mit vertretbarem Aufwand herstellbaren Kristalle für asymmetrische Reflexe den geeignetsten symmetrischen Reflexen nicht überlegen.

Bei der Betrachtung der Fokussierungseigenschaften der asymmetrischen Reflexe wurde festgestellt, dass für ein bestimmtes Radienverhältnis des torisch gebogenen Kristalls Punkt-zu-Punkt-Abbildung über einen Bereich von Braggwinkeln möglich sind. Im Gegensatz dazu entspricht bei symmetrischen Reflexionen ein Radienverhältnis immer genau einem Braggwinkel, für den Punkt-zu-Punkt-Fokussierung möglich ist. Die Bedingung für solche Foki an asymmetrischen Reflexen wurde aufgestellt und experimentell überprüft. Mögliche Anwendungen dieser meines Wissens bisher in der Literatur nicht beachteten Eigenschaft für hochauflösende Abbildung selbst bei Produktionsungenauigkeiten der Torusform sowie zur Erzeugung „gechirpter“ Röntgenpulse wurden diskutiert.

Für die Berechnung der integralen Reflexionsvermögen der in Frage kommenden Reflexionen ist die Kenntnis des Deformationsfeldes innerhalb des Kristalls unerlässlich. Im vorliegenden Fall der erzwungenen Biegung torischer Kristalle kann dieses Deformationsfeld durch die beiden Krümmungsradien und eine Zahl beschrieben werden, die der Poisson-Zahl im isotropen Fall ähnelt, jedoch nicht nur von Kristall und Kristallschnitt abhängt sondern auch von den Krümmungsradien. Das Deformationsfeld war bisher nur für einen bestimmten Satz von Kristallen und Oberflächen theoretisch bekannt. Diese Einschränkungen konnten mit einem anderen Ansatz aufgehoben werden. Alle notwendigen Rechnungen wurden beschrieben und in einem leicht bedienbaren Programm (`nurot.m`) zusammengefasst.

Eine andere Einschränkung der bisher bekannten elastizitätstheoretischen Ergebnisse ist, dass sie auf einer Näherung aufbauen, die davon ausgeht, dass die Gesamtdurchbiegung des Kristalls deutlich geringer ist als seine Dicke. Dies ist für viele gebogenen Kristalle nicht mehr der Fall. Es konnte gezeigt werden, dass eine nichtverschwindende Gauß'sche Krümmung des Kristalls eine quadratische Abhängigkeit des Braggwinkels, nicht aber der Reflexionskurvenform, vom Abstand zum Kristallmittelpunkt bedingt. Diese bisher in der Literatur nicht erwähnte Abhängigkeit konnte auch experimentell nachgewiesen werden.

# Literaturverzeichnis

- [Bla82] BLAKEMORE, J. S.: Semiconducting and other major properties of gallium arsenide. In: *J. Appl. Phys.* 53 (1982), S. 123
- [Bon60] BOND, W. L.: Precision lattice constant determination. In: *Acta. Cryst.* 13 (1960), S. 814
- [CCF94] CHUKHOVSKII, F. N. ; CHANG, W. Z. ; FÖRSTER, E.: Two-dimensional focusing x-ray optics: Application of anisotropic elasticity theory for characterization of bent crystals. In: *J. Appl. Cryst.* 27 (1994), S. 971
- [CF95] CHUKHOVSKII, F. N. ; FÖRSTER, E.: Time-dependent x-ray Bragg diffraction. In: *Acta Cryst. A* (1995) 51 (1995), S. 668
- [CFSZ92] CEMBALI, F. ; FABBRI, R. ; SERVIDORI, M. ; ZANI, A.: Precise x-ray relative measurement of lattice parameters of silicon wafers by multiple-crystal Bragg-case diffractometry. Computer simulation of the experiment. In: *J. Appl. Cryst.* 25 (1992), S. 424
- [Cha92] CHASTAIN, J. (Hrsg.): *Handbook of x-ray photoelectron spectroscopy: A reference book of standard spectra for identification and interpretation of XPS data*. 2. Auflage. Perkin-Elmer Corporation, 1992
- [CHWF96] CHUKHOVSKII, F. N. ; HÖLZER, G. ; WEHRHAN, O. ; FÖRSTER, E.: Anisotropic elasticity corrections for reflection efficiency and x-ray standing-wave patterns using bent crystals. In: *J. Appl. Cryst.* 29 (1996), S. 438
- [CK92] CHUKHOVSKII, F. N. ; KRISCH, M.: The lens equation for Bragg diffraction optics. The general case of asymmetric reflection. In: *J. Appl. Cryst.* 25 (1992), S. 211
- [COR05] *Gesamtverbundbeschreibung: Kompakte Röntgenanalytik: Hochenergie-Elektronenspektromikroskopie (CORA)*. 2005. – Verbundkoordinator: Prof. H. Zacharias, Universität Münster
- [Dir97] DIRKSMÖLLER, M.: *Einzel- und Doppelkristallanordnungen zur hochauflösenden röntgenoptischen Abbildung (Dissertation, Universität Jena)*. 1997
- [DR<sup>+</sup>95] DIRKSMÖLLER, M. ; RANCU, O. u. a.: Time-resolved x-ray monochromatic imaging of a laser-produced plasma at 0.6635 nm wavelength. In: *Optics Communications* 118 (1995), S. 379

- [Fal07] FALK, F.: *Elastizitätstheorie und Defekte in Kristallen (Vorlesungsskript, Universität Jena)*. 2007
- [FK03] FISCHER, H. ; KAUL, H.: *Mathematik für Physiker*. Bd. 3. Teubner, 2003
- [För85] FÖRSTER, E.: *Röntgendiagnostik laser-induzierter Hochtemperaturplasmen mit Hilfe Braggscher Kristallreflexionen (Habilitationsschrift, Universität Jena)*. 1985
- [Gib05] GIBBON, P.: *Short pulse laser interactions with matter*. 1. Auflage. Imperial College Press, 2005
- [Gro97] GRONKOWSKI, J.: Propagation of x-rays in distorted crystals under dynamical diffraction. In: *Physical Reports* 206 (1997), S. 1
- [GZ68] GREEN, A. E. ; ZERNA, W.: *Theoretical Elasticity*. 1. Auflage. Oxford University Press, 1968
- [Hau83] HAUSSÜHL, S.: *Kristallphysik*. Deutscher Verlag für Grundstoffindustrie, 1983
- [HFD<sup>+</sup>97] HÖLZER, G. ; FRITSCH, M. ; DEUTSCH, M. ; HÄRTWIG, J. ; FÖRSTER, E.: K  $\alpha_{1,2}$  and K  $\beta_{1,2}$  emission lines of the 3d transition metals. In: *Phys. Rev. A* 56 (1997), S. 4554
- [HOF98] HÖLZER, G. ; O., Wehrhan ; FÖRSTER, E.: Characterization of flat and bent crystals for x-ray spectroscopy and imaging. In: *Cryst. Res. Technol.* 33 (1998), S. 555
- [Käm04] KÄMPFER, T.: *Einsatz eines ellipsoidförmigen HOPG-Monochromators für Anrege-Abfrage-Experimente (Diplomarbeit, Universität Jena)*. 2004
- [Kri93] KRISCH, M.: *Spektrale und fokale Eigenschaften von gebogenen Bragg-Kristallen (Dissertation, Universität Dortmund)*. 1993
- [Lek68] LEKHNITSKII, S. G.: *Anisotropic Plates*. 1. Auflage der englischen Übersetzung. Gordon and Breach, 1968
- [MUF99] MISSALLA, T. ; USCHMANN, I. ; FÖRSTER, E.: Monochromatic focusing of subpico-second x-ray pulses in the keV range. In: *Rev. Sci. Instr.* 70 (1999), S. 1288
- [PC94] PARKER, L. ; CHRISTENSEN, S. M.: *MathTensor: A System for Doing Tensor Analysis by Computer*. 1. Auflage. Gordon and Breach, 1994
- [Pri04] PRINCE, E. (Hrsg.): *International Tables for Crystallography*. 3. Auflage. Kluwer Academic Publishers, 2004
- [PWF01] PODOROV, S. G. ; WEHRHAN, O. ; FÖRSTER, E.: Optimized polychromatic x-ray imaging with asymmetrically cut bent crystals. In: *J. Phys. D: Appl. Phys.* 34 (2001), S. 2363

- [RRG01] ROUSSE, A. ; RISCHÉL, C. ; GAUTHIER, J.: Colloquium: Femtosecond x-ray crystallography. In: *Reviews of Modern Physics* 73 (2001), S. 17
- [Tak95] TAKESHITA, K.: Chromatic aberration of an asymmetrically cut curved crystal due to the dynamical diffraction effect. In: *Rev. Sci. Instr.* 66 (1995), S. 2238
- [Tim87] TIMOSHENKO, S. P.: *Theory of plates and shells*. Nachdruck der 2. Auflage. McGraw-Hill, 1987
- [UFGH93] USCHMANN, I. ; FÖRSTER, E. ; GÄBEL, K. ; HÖLZER, G.: X-ray reflection properties of elastically bent perfect crystals in Bragg geometry. In: *J. Appl. Cryst.* 26 (1993), S. 405
- [UMF97] USCHMANN, I. ; MALGRANGE, C. ; FÖRSTER: Measurement of a bent-crystal rocking curve with oscillations. In: *J. Appl. Cryst.* 30 (1997), S. 1150
- [Vol98] VOLLBRECHT, M.: *Einsatz und Weiterentwicklung von gebogenen Kristallen zur Plasmadiagnose im Wellenlängenbereich von 0,3 – 2,66 nm (Dissertation, Universität Jena)*. 1998
- [Weh07] WEHRHAN, O.: *persönliche Mitteilung*. 2007
- [WS90] WITTRY, D. B. ; SUN, S.: X-ray optics of doubly curved monochromators. In: *J. Appl. Phys.* 67 (1990), S. 1633
- [Zac45] ZACHARIASEN, W. H.: *Theory of X-ray diffraction in crystals*. Dover Publications, 1994 (unveränderter Nachdruck der Originalausgabe von 1945)

## Danksagung

Abschließend möchte ich allen danken, die mir die Erstellung dieser Arbeit ermöglicht haben. Herrn Prof. Dr. Förster danke ich für das interessante Thema und viele Hinweise und fordernde Aufgabenstellungen auch aus den angrenzenden Gebieten sowie Herrn Dr. Uschmann für die Betreuung der Arbeit.

Für die sehr gute Zusammenarbeit möchte ich mich bei „meinen Doktoranden“ bedanken (keine Reihenfolge!): Andrea Lübcke, Flavio Zamponi, Robert Löttsch, Tino Kämpfer, Ulf Zastrau und Sebastian Höfer, die stets ein offenes Ohr für meine Probleme hatten und häufig gute Ideen beigesteuert haben. Insbesondere Robert bin ich zu Dank verpflichtet, da er mir die Messungen des ortsabhängigen Braggwinkels an der von ihm aufgebauten Messapparatur ermöglicht und mich weitgehend dabei unterstützt hat.

Eine besondere Hilfe war mir auch der Umstand, dass ich das Büro mit Frau Dr. Wehrhan teilen durfte. Ich danke ihr dafür, dass sie mich an ihrer langjährigen Erfahrung bei der Kristallpräparation und mit den Eigenschaften der gebogenen Kristalle teilhaben ließ.

Die Herleitung von Gleichung 4.10 wäre mir nicht ohne die Hilfe des Programms MathTensor gelungen. Ich danke Herrn Prof. Dr. Schäfer vom theoretisch physikalischen Institut dafür, dass er mir den Zugang zu diesem teuren Spezialprogramm ermöglicht hat.

In diesem Zusammenhang möchte ich mich auch für die Hilfe von Herrn Dr. Falk vom IPHT Jena bedanken, der sich zusätzlich zu seiner sehr empfehlenswerten Vorlesung „Elastizitätstheorie und Defekte in Kristallen“ die Zeit nahm meinen Überlegungen zum elastischen Zustand gebogener Kristalle kritisch zu überdenken.

Herzlichen Dank!

## **Selbständigkeitserklärung**

Ich erkläre, dass ich die vorliegende Arbeit selbständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel verwendet habe.

Jena, 13. September 2007

---

Hilmar Straube

## **Einverständnis zur öffentlichen Nutzung**

Seitens des Verfassers bestehen keine Einwände, die vorliegende Diplomarbeit für die öffentliche Nutzung in der Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek zur Verfügung zu stellen.

Jena, 13. September 2007

---

Hilmar Straube